



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

VICTOR LUIZ QUITO

# Estudos de Sistemas Quânticos Fortemente Desordenados

Campinas

2016

VICTOR LUIZ QUITO

Estudos de Sistemas Quânticos Fortemente Desordenados

*Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.*

*Orientador:* Eduardo Miranda

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO VICTOR LUIZ QUITO, E ORIENTADA PELO PROF. DR. EDUARDO MIRANDA.

*Eduardo Miranda*

Campinas

2016

**Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s):** FAPESP, 2009/17531-3 ; FAPESP, 2012/17082-7

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin  
Valkíria Succí Vicente - CRB 8/5398

Q48e Quito, Victor Luiz, 1988-  
Estudos de sistemas quânticos fortemente desordenados / Victor Luiz  
Quito. – Campinas, SP : [s.n.], 2016.

Orientador: Eduardo Miranda.  
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física  
Gleb Wataghin.

1. Magnetismo. 2. Sistemas desordenados. 3. Grupo de renormalização. 4.  
Heisenberg, Modelo de. I. Miranda, Eduardo, 1963-. II. Universidade Estadual  
de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Studies of strongly disordered quantum systems

**Palavras-chave em inglês:**

Magnetism

Disordered systems

Renormalization group

Heisenberg model

**Área de concentração:** Física

**Titulação:** Doutor em Ciências

**Banca examinadora:**

Eduardo Miranda [Orientador]

Alex Antonelli

Ricardo Luis Doretto

André de Pinho Vieira

Francisco Castilho Alcaraz

**Data de defesa:** 22-02-2016

**Programa de Pós-Graduação:** Física

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE VICTOR LUIZ QUITO – RA: 064930 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 22/02/2016.

**COMISSÃO JULGADORA:**

- Prof. Dr. Eduardo Miranda – (Orientador) – IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Alex Antonelli – IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Ricardo Luis Doretto – IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. André de Pinho Vieira – IF/USP
- Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz – IFSC/USP

A Ata de Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no processo de vida acadêmica do aluno.

# Agradecimentos

Começo pelos meus amigos Pedro Lopes, Vinícius Duarte, Pedro Duque, Priscila Ferrari e Paraj Titum, pelas discussões estimulantes e pelo suporte, sem os quais meu doutorado não teria sido tão proveitoso e prazeroso.

Ao Professor Eduardo Miranda, que me orientou durante o doutorado, por ter me passado o exemplo de erudição acadêmica e perseverança. Agradeço também ao Professor José Abel Hoyos, pela colaboração de longa data, e pelas produtivas e agradáveis visitas a São Carlos.

Agradeço ao meus pais, Sandra Annibal e Silvio Quito que, desde cedo, me mostraram o valor do estudo e aprendizado. Acredito que este estímulo tenha sido crucial para a minha escolha de seguir a carreira de Físico. Agradeço também à minha avó, Maria Stofanelli.

Aos professores Alberto Saa, Alex Antonelli, Amir Caldeira, Antônio Manoel Mansanares, Gaston Barberis, Kyoko Furuya, Marcus Aguiar e Orlando Peres, pelo esforço e dedicação ao lecionar disciplinas que foram fundamentais para minha formação como aluno.

Aos meus amigos de Valinhos, em especial Renato Costa, Marina Fioravanti, Matheus Rovere, Fernando Gripe, Emille Rodrigues e Anike Fernanda, pelo prazeroso convívio durante meu Doutorado, e nos muitos anos anteriores.

Ao meu supervisor de sanduíche, Gil Refael, e a todos os amigos que me acolheram no tempo de sanduíche nos Estados Unidos, em especial, Scott Geraedts, Tejaswi Venumadhav e Min-Feng Tu.

A todos os meus colegas de sala, aos meus colegas de ônibus fretado e aos alunos para os quais dei aula.

À FAPESP, pelo suporte financeiro, através dos processos 2009/17351-3 e 2012/17082-7.

## Resumo

Sistemas unidimensionais desordenados destacam-se por apresentar fenômenos sem análogos nos casos sem desordem ou em dimensões maiores. Fenômenos inerentes a sistemas com desordem incluem fases antiferromagnéticas de sistemas de spins, onde o estado fundamental é formado por coleções de singletos de pares de spins, e localização de Anderson, onde a função de onda apresenta decaimento exponencial. Nesta Tese, estudamos alguns casos onde a física de baixas energias é dramaticamente alterada quando o sistema é desordenado, incluindo os exemplos citados anteriormente.

Além de sistemas que apresentam as propriedades físicas anteriores, elucidamos ainda um mecanismo genérico que leva ao aumento de simetria de baixas energias em sistemas de spins desordenados, um tema não explorado previamente. Investigamos os efeitos de desordem em cadeias de spin genéricas em uma dimensão, sendo as interações invariantes por rotação do sistema de coordenadas e por reversão temporal. Para tanto, consideramos todos os termos possíveis que preservam estas simetrias. Tais termos vão além do habitual termo de Heisenberg, em cadeias de spin  $S > \frac{1}{2}$ .

Em cadeias de spin 1, encontramos distintas fases antiferromagnéticas onde o estado fundamental é composto de uma coleção de singletos de spins cujas posições são aleatórias. Em baixas energias, a desordem efetiva nestas fases cresce sem limites; tais fases são chamadas, portanto, de “fases de desordem infinita”. Mais surpreendentemente, verificamos que nas fases antiferromagnéticas a simetria de baixas energias é aumentada, de  $SU(2)$  para  $SU(3)$ . Tal verificação é feita a partir do mapeamento de operadores de spin monopolares, dipolares e quadrupolares para geradores de representações de  $SU(3)$ , e a posterior constatação de que a física de baixas energias é invariante por rotações com tal grupo de geradores. Em analogia com a física de partículas, uma das fases é do tipo “bariônica”, onde o estado fundamental é composto de singletos de coleções de três spins (ou quarks formando um singlete de cor, pela analogia com altas energias), enquanto outra fase é do tipo “mesônica”, sendo o estado fundamental uma sopa de pares de spins (ou pares quark-antiquark, pela analogia). Além das fases antiferromagnéticas, mapeamos o diagrama de fases completo da cadeia de spin 1 bilinear e biquadrática (nos operadores de spin) no regime de desordem finita, incluindo fases ferromagnéticas e fases de spin alto. Nestas, o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo competem, o que se reflete no crescimento de spin efetivos, que são os graus de liberdade efetivos em baixas energias, ser mais lento que no caso ferromagnético. Ao contrário das fases antiferromagnéticas, nestas fases de spin alto, a desordem efetiva satura em um valor finito.

Estendemos o estudo para spins  $S > 1$  através do uso de tensores esféricos irredutíveis, que se mostram a linguagem natural para construção das regras de dizimação e análise do fluxo do grupo de renormalização para desordem forte. Novamente, incluímos todos os termos possíveis que respeitam invariância por rotação  $SU(2)$  e reversão temporal. Descobrimos que há também simetria aumentada nas fases antiferromagnéticas em baixas energias, agora para o grupo  $SU(2S+1)$ , simetria esta herdada de um ponto no espaço de parâmetros onde o mapeamento para  $SU(2S+1)$  é exato em todas as escalas de energia. Esta é uma generalização da fase “mesônica”  $SU(3)$  de cadeias de spin 1. Nós também discutimos o porquê da fase “bariônica” ser muito mais restritiva e, portanto, especial da cadeia de spins 1.

Outro objeto de nosso estudo foram sistemas de férmions não-interagentes em uma dimensão. Os “hoppings” de longo alcance são escolhidos tendo um desvio padrão com decaimento em função da distância entre sítios, em forma de lei de potência. Para tal estudo, estendemos o método de Equações de Fluxo, pioneiramente proposto por Wegner, para sistemas desordenados. Acoplado a esta extensão do método, propusemos uma técnica de grupo de renormalização. A combinação do uso direto das Equações de Fluxo, mais o método de grupo de renormalização, permitiu o mapeamento completo do diagrama de fases, com uma fase estendida (não-localizada) para expoentes de decaimento menores que um, e uma fase localizada para expoentes maiores que um. O caráter localizado ou delocalizado de determinada fase é determinado tanto pela evolução da distribuição de acoplamentos, quanto pelos autovalores do Hamiltoniano, através da medida de sua repulsão mútua entre níveis.

## Abstract

One-dimensional random systems are known to present phenomena that have no analog in the zero-disorder limit or in higher dimensions. Among the phenomena inherent to disordered systems are the antiferromagnetic phases of spin systems, where the ground state is formed by a collection of spin pairs, and the Anderson localization, where disorder leads to the exponential decay of the wave function. In this Thesis, we study some cases where the low-energy physics is dramatically changed by disorder, including the two previous examples mentioned above.

Besides systems that provide the physical properties listed above, we elucidate a generic mechanism that allows the symmetry enhancement in random spin systems, a theme that was previously unexplored. We investigate the effects of disorder in generic one-dimensional spin chains, with spins coupled by interactions that are invariant under rotation of the system's coordinates and time reversal. We consider all the possible terms that respect those symmetries. These terms go beyond the standard Heisenberg couplings in chains where  $S > \frac{1}{2}$ .

In spin-1 chains, we find distinct antiferromagnetic phases, where the ground state is formed by a collection of spin singlets, whose positions are arbitrary. In low energies, the effective disorder in such phases grow without bounds, and, therefore, these phases are called "infinite-disorder phases". Even more surprising is the fact that in these antiferromagnetic phases, the low-energy symmetry is enhanced, from  $SU(2)$  to  $SU(3)$ . In order to make such claim, we map out the spin operators, including monopolar, dipolar and quadrupolar operators, into generators of  $SU(3)$  representations. We verify that the low energy physics is invariant under rotation that use this set of operators as generators. In analogy with particle physics, one of the phases is a "baryonic phase", where the ground state is a collection of three-spin singlets (or quarks that are bounded to form color singlets, using the high-energy analogy), while the other phase is of the "mesonic" type, with the ground state formed by spin pairs (or quark-antiquark pairs, using the analogy). Besides the antiferromagnetic phases, we map the complete phase diagram of the spin-1 bilinear and biquadratic spin chains in the finite disorder regime, including also the ferromagnetic phase and a large spin phase. In the latter, the ferromagnetism and antiferromagnetism compete. This competition reflects on the effective spin size. These effective spins are the low-energy degrees of freedom, and the growth is slower than in the ferromagnetic case. Unlike in the antiferromagnetic phase, in these other phases, the effective disorder saturates at a finite value.

We extend the study to spins greater than one by using irreducible spherical tensors, that are shown to be the natural language for building the decimations and the the strong-disorder renormalization group flow. Again, we include all the possible terms that are invariant under  $SU(2)$  rotations and time reversal. We find that the low energy physics of antiferromagnetic phases present a symmetry enhancement, with the  $SU(2S+1)$  being the low-energy symmetry. This symmetry is inherited from a point in the parameter space where the mapping to  $SU(2S+1)$  is exact in all energy scales. This is a generalization of the "mesonic"  $SU(3)$  phase. We also discuss why the "baryonic" phases are much more restrictive, and present only in the spin-1 chain.

Another system that we consider is the non-interacting long-range hopping fermionic chain. The hoppings are chosen with a standard deviation decaying as a power-law with distance. To study such chains, we extend the Flow Equation Method, developed by Wegner, for systems with disorder. Coupled to this extension of the method, we develop a renormalization group technique, which allowed us to map the full phase diagram, with an extended phase at decaying exponents less than one, and a localized phase for exponents greater than one. The localized or delocalized phases can be probed by either the evolution of the coupling distribution or by the eigenvalues of the Hamiltonian, and its associated level repulsion.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>Grupo de Renormalização para Desordem Forte</b>	<b>14</b>
2.1	Necessidade de novos métodos: um exemplo simples	14
2.2	Aplicação do Grupo de Renormalização para sistemas desordenados	15
2.3	Descrição qualitativa do estado fundamental antiferromagnético	15
2.4	Distribuição de acoplamentos	16
2.5	Escalamento e solução da equação de fluxo	17
2.6	Propriedades físicas a partir da distribuição de ponto fixo	18
2.7	Outras fases relevantes	19
2.7.1	“Large Spin Phase”	19
2.7.2	Fase de singletos aleatórios de Hamiltonianos com Simetria SU(N)	20
2.8	Conclusões	21
<b>3</b>	<b>Emergência de simetria SU(3) em cadeias de spin 1 desordenadas</b>	<b>22</b>
3.1	Introdução: simetrias emergentes	22
3.2	Modelo	23
3.3	Caso sem desordem	23
3.4	Problema de dois spins	24
3.5	Procedimento de Grupo de Renormalização	24
3.6	Fluxos do Grupo de Renormalização	27
3.6.1	Pontos fixos com simetria SU(3)	28
3.7	Diagrama de fases	30
3.8	Resultados numéricos	31
3.9	Comportamento no regime de desordem baixa	33
3.10	Simetria emergente SU(3)	34
3.11	Conclusões	35
<b>4</b>	<b>Tensores esféricos irredutíveis e Hamiltonianos de spin</b>	<b>36</b>
4.1	Tensores esféricos irredutíveis: definição	36
4.2	Hamiltoniano de spin em termos de Tensores Esféricos Irredutíveis	37
4.3	Elementos de matriz de TEIs	38
4.4	Geradores de SU(N) em termos de TEIs	39
4.5	Hamiltonianos de Tensores Esféricos Irredutíveis invariantes por transformações SU(N)	40
4.5.1	Representações fundamental e antifundamental de SU(N) em sítios alternados	40
4.5.1.1	Em termos de TEIs	40
4.5.2	Representação fundamental de SU(N) em todos os sítios	41
4.6	Conclusões	42
<b>5</b>	<b>Cadeias de spin desordenadas invariantes por rotações</b>	<b>43</b>
5.1	Breve Introdução: Sistemas invariantes por transformações SU(2)	43
5.2	Procedimento de Grupo de Renormalização	44
5.2.1	Teoria de perturbação de primeira ordem	44
5.3	Teoria de Perturbação de Segunda Ordem envolvendo singletos	46
5.4	Pontos fixos AFs e a classificação de estabilidade	47
5.4.1	Fase de singletos aleatórios com $\psi = \frac{1}{2}$	47
5.4.1.1	Pontos fixos sobre os eixos onde o singlete é o estado fundamental	48
5.4.1.2	Estabilidade dos pontos fixos	48
5.4.1.3	Outros pontos fixos antiferromagnéticos de $\psi = \frac{1}{2}$	49

5.4.2	Fases de singletos aleatórios de $\psi = \frac{1}{3}$	50
5.5	“Large Spin Phase”	51
5.6	Cadeia de spins $\frac{3}{2}$	51
5.6.1	Dizimação sobre um eixo	52
5.6.1.1	Fluxo nos outros semi-eixos	52
5.6.2	Dizimações nos planos	53
5.6.2.1	Fluxo no octante antiferromagnético (região azul)	54
5.6.2.2	Fluxo do GR em outras regiões nos planos	55
5.6.3	Linha SO(5) e pontos SU(4)	56
5.6.4	Fluxo antiferromagnético sobre a superfície da esfera	57
5.7	Cadeia de spins 2	59
5.8	Conclusões	61
<b>6</b>	<b>Equações de Fluxo</b>	<b>64</b>
6.1	Introdução às Equações de Fluxo	64
6.2	Exemplo simples: partícula no campo magnético	66
6.3	Conclusões	67
<b>7</b>	<b>Equações de fluxo aplicadas ao Hamiltoniano de Anderson</b>	<b>68</b>
7.1	Modelo de Anderson com interações de longo alcance	68
7.1.1	Diagrama de fases	68
7.1.1.1	Limites $\alpha \rightarrow 0$ e $\alpha \rightarrow \infty$	68
7.1.1.2	O ponto crítico	69
7.2	Equações de fluxo para o problema de Anderson	70
7.2.1	Solução do problema de dois sítios	72
7.2.2	Problema de $N$ sítios	72
7.3	Grupo de Renormalização a partir de Equações de Fluxo	74
7.4	Equação do grupo de renormalização no ponto crítico	76
7.4.1	Solução no ponto crítico	77
7.5	Resultados numéricos	78
7.6	Conclusões	79
<b>8</b>	<b>Conclusões</b>	<b>82</b>
<b>A</b>	<b>Regras de dizimação para cadeias de Heisenberg de spin <math>S</math></b>	<b>88</b>
A.1	Dizimação de singletos	88
A.2	Dizimação no caso de momento angular finito	89
<b>B</b>	<b>Introdução ao grupo SU(N)</b>	<b>91</b>
B.1	O grupo SU(2)	91
B.2	O grupo SU(3)	92
B.3	O grupo SO(5) e o grupo SU(4)	93
<b>C</b>	<b>Física de Partículas: Breve Introdução</b>	<b>95</b>
C.1	Os quarks	95
C.2	Mésons	95
C.3	Bárions	95
C.4	Relação com o grupo SU(3)	95
<b>D</b>	<b>Demonstração de que <math>\hat{O}_J</math> é um operador escalar</b>	<b>97</b>
<b>E</b>	<b>Cálculo de elementos de matriz reduzidos</b>	<b>98</b>
E.1	Elementos de matriz reduzidos de operadores um corpo	98
E.2	Teoria de perturbação de primeira ordem	98
E.3	Teoria de perturbação de segunda ordem	99
<b>F</b>	<b>Indo além da primeira ordem de teoria de perturbação quando <math>\tilde{S} \neq 0</math></b>	<b>101</b>
F.1	Semi-eixo $K^{(3)} < 0$	101
F.2	Semi-eixo $K^{(2)} > 0$	102

# Capítulo 1

## Introdução

Defeitos e impurezas podem levar a fases e a transições de fase que não têm análogo em sistemas sem tais imperfeições. Ao mesmo tempo, defeitos e impurezas, em maior ou menor grau, são inevitáveis em experimentos. De maneira geral, chamamos de *desordem* o conjunto de tais imperfeições. Como exemplos de novos fenômenos oriundos da introdução de desordem estão a localização de Anderson [1] e fases de singletos aleatórios com desordem efetiva infinita [2, 3, 4].

Existem vários métodos desenvolvidos no passar dos últimos 50 anos que permitem tratar sistemas desordenados (para detalhes de alguns desses métodos ver [5, 6, 7, 8] e demais referências lá contidas). De maneira geral, o tratamento de sistemas com desordem pode ser separado em duas grandes classes [9]. De um lado, há os sistemas em que o tratamento começa por tomar a média sobre a desordem, com a meta de calcular observáveis auto-promediáveis (“self-averaging”). Para este caso, foram desenvolvidos métodos como a técnica de réplicas [10], uso de supersimetria [11] e métodos dinâmicos [10]. Uma vez que a média sobre a desordem é calculada, estes sistemas passam a ser descritos de maneira análoga a sistemas sem desordem, sendo a desordem responsável pela renormalização dos parâmetros do sistema limpo análogo.

De outro lado, e de maior interesse nesta tese, estão os métodos que vislumbram descrever a heterogeneidade introduzida pela desordem explicitamente. Devido ao grande espectro de energias e escalas de comprimento introduzidos na descrição destes sistemas, é esperado que métodos perturbativos que descrevem a classe onde a média sobre a desordem é tomada *a priori* não sejam adequados para a descrição de baixas energias destas fases, onde a desordem efetiva pode vir inclusive a crescer sem limites. Um método mais adequado é o do Grupo de Renormalização para Desordem Forte (SDRG, do inglês “Strong Disorder Renormalization Group”) [12, 13, 14, 15], que usa a desordem como ponto de início e que descreve como a distribuição de comprimentos e energias se comporta durante o processo de granulação introduzido pelo grupo de renormalização.

Um exemplo da classe de sistemas físicos onde a desordem leva a novas fases da matéria são as cadeias antiferromagnéticas de Heisenberg com spins quaisquer, no regime de desordem alta. Uma representação esquemática destas cadeias pode ser encontrada na Fig. 1.1. A física de baixas energias destas cadeias de spins desordenadas foi pioneiramente estudada no fim da década de 1970, por Ma e Dasgupta [12, 13], e a física de baixas energias foi elucidada na década de 1990, por Daniel Fisher [2, 4, 3]. O estado fundamental é composto por uma coleção de singletos formados por pares de spins formados segundo a hierarquia das constantes de

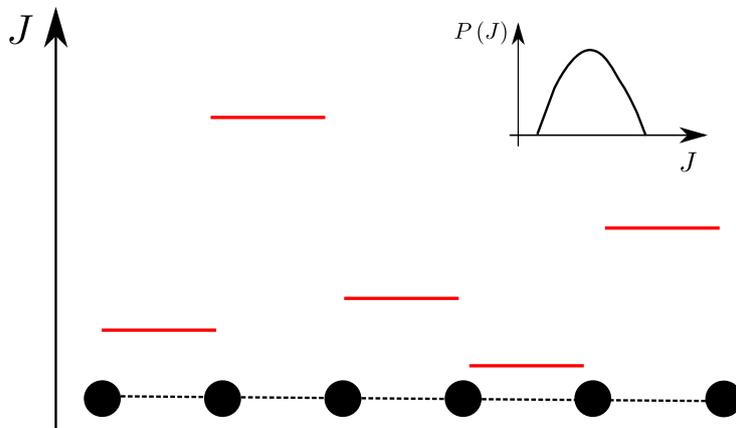


Figura 1.1: Representação esquemática de um sistema de spins unidimensional desordenado. Os spins são representados pelas esferas pretas e o acoplamento de Heisenberg  $J$  tem intensidade representada pelas linhas vermelhas. Os acoplamentos são escolhidos com base em uma distribuição de probabilidade  $P(J)$ .

acoplamento que os unem [14, 15]. Esta fase é chamada de “fase de singletos aleatórios” (RSP, do inglês “*Random Singlet Phase*”). A susceptibilidade  $\chi$ , por exemplo, diverge como  $(T \ln^{1/\psi} T)^{-1}$ , com um expoente de tunelamento  $\psi$  independente da desordem e igual a  $\frac{1}{2}$ . A distância entre spins que formam os pares também pode atingir valores arbitrariamente altos [16].

Também característico de sistemas desordenados onde a desordem é relevante e refletido nesta fase é que o comportamento típico e médio devem ser distinguidos. De fato, em sistemas desordenados existem regiões exponencialmente improváveis onde eventos raros surgem de maneira a dominar estatísticas médias. Como exemplos deste fenômeno estão as chamadas fases de Griffiths [17] nas quais regiões de rara probabilidade induzem singularidades tanto no regime estático [17] quanto na região dinâmica, que passa a ser muito lenta [18, 19], além da fase RSP descrita anteriormente. Na fase RSP, enquanto os valores típicos das correlações de spin decaem exponencialmente com a distância  $r$  como  $\sim \exp(-r^\psi)$ , a média decai como lei de potência da forma  $r^{-4\psi}$ .

Atribui-se à RSP uma desordem efetiva infinita, uma vez que a desordem efetiva em baixas energias cresce sem limites (no sentido do fluxo do grupo de renormalização). Mais tarde descobriu-se que o comportamento de desordem infinita não está restrito às cadeias de spin antiferromagnéticas de Heisenberg. Outros exemplos de sistemas que apresentam fases de desordem infinita incluem os pontos multicríticos de cadeias de spins dimerizadas [20], cadeias com simetria  $SU(N)$  [21] e cadeias de ânions não abelianos [22]. Para cadeias dimerizadas, o expoente  $\psi$  tem valor igual a  $\psi = 1/N_1$ , onde  $N_1$  é o número de fases dimerizadas encontradas no ponto multicrítico (menor ou igual a  $2S + 1$ , onde  $S$  é o valor do spin). No caso de sistemas invariantes pela simetria  $SU(N)$ ,  $\psi = 1/N_2$ , com  $N_2$  sendo o número de representações diferentes de  $SU(N)$  presentes em baixas energias (o máximo valor possível é  $N$ ). No modelo de ânions,  $\psi = 1/N_3$  sendo  $N_3 = k$  o nível de  $SU(2)$  em que a série de Clebsch-Gordan é truncada. De maneira geral, o estado fundamental passa a ser formado por singletos, não mais de spins  $SU(2)$ , mas sim generalizados de acordo com o problema estudado.

Além das cadeias antiferromagnéticas com RSPs descritas acima, que são naturalmente descritas sob o escopo do SDRG, este método foi aplicado também com êxito em diversos outros sistemas (para uma revisão, ver [9]). Alguns deles são:

1. Fases com excitações cujos spins podem variar. Por exemplo, na cadeia de spin 1, existem duas fases, uma onde as excitações têm spin  $1/2$  (quando a desordem inicial é baixa) e outra com excitações de spin 1 (quando a desordem inicial é alta) [23, 24]. Há uma transição de fase entre as duas fases. Comportamento similar foi também encontrado em cadeias de spin  $3/2$  [25].
2. Quando há acoplamentos ferromagnéticos e antiferromagnéticos, a fase obtida é uma fase de spins grandes, em que os graus de liberdade efetivos são spins arbitrariamente altos, mas cujo valor médio cresce mais lentamente que no caso puramente ferromagnético [26, 27]. Além disso, susceptibilidade magnética diverge como uma lei de Curie e o coeficiente do calor específico vai com  $C(T)/T \sim |\ln T|/T^{1-1/z}$  [26, 27].
3. Cadeias de spins inteiros têm uma fase de Griffiths quântica [17, 28] para desordem fraca, na qual a susceptibilidade magnética  $\chi(T)$  e o coeficiente linear do calor específico  $C(T)/T$  divergem como uma lei de potência não-universal e variável.

Apesar do enorme progresso na análise de cadeias unidimensionais desordenadas, várias lacunas permanecem. Não há, por exemplo, um critério simples para decidir se uma classe de cadeias de spin apresentará uma fase de singletos aleatórios. Nesta tese, contribuimos para esta questão estudando uma grande classe de sistemas invariantes por rotações (ou, equivalentemente, por transformações globais do grupo  $SU(2)$ ) e por reversão temporal.

Além da motivação teórica mencionada anteriormente, esta classe de sistemas é experimentalmente relevante, uma vez que descreve o setor de baixas energias de sistemas de átomos frios em redes ópticas comensuráveis [29]. Nestas redes, em baixas energias, somente espalhamentos de onda  $s$  são relevantes, o que, juntamente com a simetria da função de onda, seleciona somente estados de momento angular total ímpares de pares de spins vizinhos. Tal seleção é consequência da função de onda de um par de átomos bosônicos de spin inteiro (ou fermiônicos, de spins semi-inteiros) ser simétrico (ou anti-simétrico) com relação à troca de dois spins.

Uma outra questão envolvendo sistemas desordenados que nunca fora explorada anteriormente e que estudamos nesta tese, é se o fato do sistema ser desordenado pode dar margem à emergência de simetrias. Uma simetria é dita emergente se o estado fundamental do sistema total for formado por uma coleção de subsistemas acoplados por termos que quebrem esta simetria em altas energias, mas que sejam *irrelevantes* (no sentido de Grupo de Renormalização) para a descrição de baixas energias [30, 31]. Ou seja, se a física de baixas energias for efetivamente invariante por um grupo maior que o grupo de simetria do Hamiltoniano. Nesta tese, mostraremos que, de fato, sob a óptica do SDRG, existe uma rota possível para aumento de simetria em baixas energias. Em uma cadeia desordenada genérica invariante por rotação e composta por spins 1 é possível obter uma fase em que a simetria de baixas energias é  $SU(3)$ , sendo o Hamiltoniano invariante apenas por transformações  $SU(2)$  [32]. A emergência da simetria  $SU(3)$  pode ser evidenciada por funções resposta, como susceptibilidades

e funções de correlação de operadores de  $SU(3)$  apropriadamente definidos (dipolos e quadrupolos de spin), que são governados por expoentes universais de  $SU(3)$  ( $\psi = \frac{1}{3}$ ). Além disso, se mostra possível fazer uma analogia com a física de partículas, já que a simetria  $SU(3)$  é uma das simetrias do Modelo Padrão. Em cadeias de spins maiores que 1, a simetria emergente é  $SU(2S+1)$ , onde  $S$  é o valor do spin. Ao contrário do caso de spin 1, que admite fases mesônicas e bariônicas, somente a fase mesônica está presente para spins maiores.

Outro exemplo extremo onde desordem leva a novas fases da matéria é no caso da localização de Anderson. O Hamiltoniano mais simples que apresenta esta física corresponde a uma coleção de férmions não interagentes, com "hopping" de curto alcance e desordem nas energias dos sítios [1, 33]. Em uma dimensão, é conhecido que todos os autovetores do sistema são localizados [34, 1], ou seja, que o módulo quadrático das autofunções, centradas em posições aleatórias, decaem exponencialmente, com a escala de comprimento sendo dada pelo chamado comprimento de localização  $\xi$ . Tal fenômeno de localização foi experimentalmente verificado em redes fotônicas desordenadas [35, 36]. Este caso contrasta dramaticamente com o caso sem desordem onde é possível encontrar as autofunções por uma análise de Fourier, e todas estas autofunções são estendidas pelo volume do sistema. Por outro lado, quando hoppings de longo alcance são introduzidos, é possível encontrar fases delocalizadas e transições entre as fases localizada e delocalizada. Um caso de hoppings de longo alcance é quando estes seguem distribuições de probabilidade cuja amplitude média decai como lei de potência da distância, com expoente  $\alpha$ . O limite de  $\alpha$  grande recupera o resultado de hoppings de primeiros vizinhos, onde os autoestados são localizados para qualquer desordem diagonal finita. Por outro lado, da teoria de matrizes aleatórias, é sabido que em  $\alpha = 0$  todos os autoestados são delocalizados [37, 38]. Apesar do caráter unidimensional do sistema, se faz então possível haver uma transição de fase em função de  $\alpha$ . O diagrama de fases desse sistema para qualquer valor de  $\alpha$  foi estudado sistematicamente por Mirlin e colaboradores [39], usando o método de supersimetria. Nesta tese, revisitamos este problema sob uma nova ótica.

Esta tese está estruturada da seguinte forma. A introdução detalhada do SDRG será feita no Capítulo 2. Também serão revisadas em detalhes as fases que serão relevantes nos Capítulos seguintes, e que são naturalmente obtidas da análise do fluxo do SDRG. São estas as RSP, de distintos valores de  $\psi$ , além da LSP.

No Capítulo 3, tratamos da emergência de simetria em sistemas desordenados, pelo estudo do diagrama de fase de cadeias de spin 1 invariantes por rotação e reversão temporal. Em particular, além de dar uma rota de como tal emergência pode ocorrer, mostramos que as fases antiferromagnéticas realizam uma simetria  $SU(3)$ , maior que a simetria  $SU(2)$  do Hamiltoniano. Fazemos ainda uma analogia entre as fases  $SU(3)$  e a física de partículas elementares, já que os hádrons são singletos de cor do grupo  $SU(3)$ .

No Capítulo 4, introduzimos a linguagem de tensores esféricos irredutíveis, além de algumas propriedades úteis para o estudo de cadeias de spins. No Capítulo 5, mostramos que cadeias de spins  $S$  invariantes por rotação admitem  $2S + 1$  pontos fixos antiferromagnéticos *estáveis*, cujos estados fundamentais são RSPs. Mostramos que estes estados fundamentais são invariantes por transformações do grupo  $SU(2S + 1)$ , análogos aos mésons  $SU(3)$  da cadeia de spin 1. Um dos pontos fixos que encontramos é o correspondente ao habitual Hamiltoniano de Heisenberg. O fato deste ter um estado fundamental invariante por um grupo maior que  $SU(2)$  é um fato que não havia sido percebido anteriormente, e que aparece naturalmente quando cadeias genéricas invariantes por rotação e reversão temporal são estudadas. Estudamos também a questão de se a emergência de simetria  $SU(3)$  do tipo "bariônico" em cadeias de spin  $SU(2)$  é um fenômeno genérico de cadeias isotrópicas de spin, ou somente presente em cadeias de spin 1. A resposta envolve notar que ter um expoente  $\psi = \frac{1}{3}$  é condição necessária, mas não suficiente para a emergência de simetria  $SU(3)$  do tipo bariônico, que se mostra muito mais restritiva que no caso mesônico. De fato, somente em cadeias de spin 1 encontramos tal fase bariônica.

No Capítulo 6, introduzimos o método de Equações de Fluxo, revisando os principais passos que são necessários para a aplicação do método, além de um exemplo simples para ilustrar o método, de um spin em um campo magnético em um plano.

No Capítulo 7, revisitamos o problema de localização de Anderson em Hamiltonianos com "hoppings" de longo alcance usando a ótica das Equações de Fluxo, sendo esta a primeira utilização de tal método para sistemas desordenados. É possível ainda inferir, das Equações de Fluxo, um método de grupo de renormalização que permite achar aproximações para *todos* os autovalores do problema. Note a distinção em relação ao SDRG, que é uma ferramenta útil para a descrição da física de baixas energias <sup>1</sup>. Munidos das Equações de Fluxo e do procedimento de grupo de renormalização associado, é possível determinar o diagrama de fases do problema, com uma fase localizada para decaimento de lei de potência com expoente  $\alpha$  menor que 1, e uma fase delocalizada para  $\alpha > 1$ .

De maneira geral, os Capítulos 2, 4 e 6, mais técnicos, são destinados à introdução dos métodos que usaremos. Os demais Capítulos são destinados ao estudo de sistemas desordenados propriamente ditos.

<sup>1</sup>Há generalizações do SDRG que têm como meta manter o espectro todo, mas que funcionam para uma classe restrita de sistemas. Tal generalização foi chamada de SDRG-X [40].

## Capítulo 2

# Grupo de Renormalização para Desordem Forte

Neste Capítulo, introduziremos o método do Grupo de Renormalização para sistemas desordenados além de explicitarmos a física oriunda de sua utilização.

### 2.1 Necessidade de novos métodos: um exemplo simples

No caso em que não há desordem, a técnica mais comum para diagonalizar o sistema e determinar propriedades físicas é a análise de Fourier. Por exemplo, para um modelo de elétrons em um sistema unidimensional de  $N$  sítios onde somente o termo cinético é relevante, o Hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = -t \sum_i c_i^\dagger c_{i+1} + \text{H.c.}, \quad (2.1)$$

onde  $c_i$  ( $c_i^\dagger$ ) é o operador de aniquilação (criação) de elétrons no sítio  $i$  e o hopping entre vizinhos é dado por  $t$ . A transformada de Fourier

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikx_j} c_j, \quad (2.2)$$

nos fornece um Hamiltoniano diagonal nos operadores de criação e aniquilação de elétrons com momento bem definido

$$\mathcal{H} = -2t \sum_k \cos(ka) c_k^\dagger c_k, \quad (2.3)$$

onde  $a$  é o espaçamento de rede. Isto é consequência de que o momento é um bom número quântico quando o sistema não é desordenado. Mas o que acontece se o sistema é desordenado?

Suponhamos que a desordem seja inserida de maneira que o hopping entre primeiros vizinhos seja uma variável aleatória, que chamamos de  $t_i$ . O Hamiltoniano correspondente é

$$\mathcal{H}_{des} = - \sum_i t_i c_i^\dagger c_{i+1} + \text{H.c.}, \quad (2.4)$$

Se a desordem é suficientemente forte, a transformação da equação (2.2) não é mais útil, e uma outra abordagem é necessária. Uma abordagem possível é resolver o sistema numericamente, com métodos computacionais. O sistema que descrevemos anteriormente é não-interagente, o que o torna comparativamente simples para solução numérica. Mas nem sempre esse é o caso. Além disso, é desejável ter uma descrição analítica do problema que possa fornecer informações adicionais, de difícil acesso por métodos numéricos. A discussão anterior ilustra, com um exemplo extremamente simples, que as ferramentas usadas para sistemas sem desordem não se aplicam trivialmente para sistemas com desordem.

Passamos agora a um caso interagente, cujo sistema sem desordem também tem solução analítica: sistema quântico de spins  $\frac{1}{2}$  com interação entre primeiros vizinhos. Vamos descrever agora qual o método que pode ser aplicado para tal sistema (e para vários outros sistemas com desordem), fazendo uso explícito de que o sistema é desordenado. Tal método é o Grupo de Renormalização para Desordem Forte (SDRG, da sigla para “Strong Disorder Renormalization Group”).

## 2.2 Aplicação do Grupo de Renormalização para sistemas desordenados

Para ilustrar o método do SDRG, começamos com uma cadeia de Heisenberg de spins  $1/2$  antiferromagnética (AF) cujo Hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.5)$$

sendo  $\mathbf{S}_i$  o operador de spin  $\frac{1}{2}$  no sítio  $i$  e  $J_i$  é a constante de acoplamentos entre primeiros vizinhos  $\mathbf{S}_i$  e  $\mathbf{S}_{i+1}$ , que por enquanto consideraremos sendo maior que zero. As constantes de acoplamento  $J_i > 0$  são distribuídas de acordo com uma distribuição de probabilidade  $P(J)$ , que deve ser suficientemente larga para que o método perturbativo a seguir possa ser aplicado. Na Figura 1.1, representamos esquematicamente as ligações da cadeia e a distribuição de probabilidade  $P(J)$ .

O SDRG se baseia em reduzir graus de liberdade combinando spins em estados de singleto. Para isso, os passos seguintes devem ser aplicados iterativamente:

1. Encontrar o maior gap para o problema de dois spins presentes na cadeia,  $\Omega = \max[\Delta_i]$ . Nesse caso particular de spins  $1/2$ , em que o gap local é igual ao acoplamento  $J_i$ , isso corresponde ao maior  $J_i$ ,  $\Omega = \max[J_i]$ . Para fixar a ideia, consideremos que o par de spins nos sítios 2 e 3 seja o mais fortemente acoplado,  $\Omega = J_2$ .
2. Considerar  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ , onde  $\mathcal{H}_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3$  e  $\mathcal{H}_1 = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4$ , sendo  $\mathcal{H}_1$  uma perturbação de  $\mathcal{H}_0$ . Se a desordem for forte, ou seja, se o desvio padrão é alto, então, é alta a probabilidade de que  $\Omega \gg J_1, J_3$ , o que justifica considerar  $\mathcal{H}_1$  como perturbação de  $\mathcal{H}_0$ . Os demais sítios  $i \neq 1, 2, 3, 4$  não são afetados por estes passos e portanto podem ser ignorados.
3. Eliminar os graus de liberdade relativos aos spins  $\mathbf{S}_2$  e  $\mathbf{S}_3$  do sistema, congelando esses dois spins em um estado de singleto, e acoplar os spins  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_4$  com

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4, \quad (2.6)$$

$$\text{com } \tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{2\Omega}.$$

4. Iterar os passos acima até que o Hamiltoniano seja totalmente resolvido, ou seja, todos os spins sejam removidos da cadeia, ou até  $\Omega$  atingir um valor da ordem da temperatura de interesse  $T$ .

O cálculo detalhado para mostrar que, perturbativamente, os passos descritos acima fazem sentido é mostrado no Apêndice A. Neste problema, é evidente que a nova constante de acoplamento  $\tilde{J}$  é menor que aquela retirada da cadeia  $\Omega$ . Isto não é necessariamente o caso para spins maiores que  $\frac{1}{2}$ , conforme comentaremos mais tarde (ver também o Apêndice A, que contém a derivação do novo acoplamento para qualquer valor de spin). Em tais casos, o procedimento anterior necessita ser alterado para desordem baixa.

O congelamento de pares de spins mais fortemente acoplados no estado de singleto é justificado pelo fato de que o GR visa estudar o comportamento de baixas energias do sistema. O fato da desordem ser forte justifica o tratamento perturbativo para os spins vizinhos, já que, quanto maior a desordem, mais alta a probabilidade desses serem destes serem muito menores que  $\Omega$ .

Fica claro que as regras que mostramos são fechadas, de tal maneira que podem ser iteradas para cadeias maiores até chegarmos a uma distribuição de acoplamentos que não muda mais (em variáveis propriamente definidas), sendo esta a distribuição de ponto fixo. Existem diferentes distribuições iniciais  $P(J)$  que fluem para a mesma distribuição de ponto fixo  $P^*(J)$ , o que determina a bacia de atração de  $P^*(J)$  e o caráter universal da distribuição. Tal característica é ilustrada na Fig. 2.1.

## 2.3 Descrição qualitativa do estado fundamental antiferromagnético

As regras de dizimação descritas acima permitem uma visualização do estado fundamental, desde que a hipótese de que a teoria de perturbação, usada no passo 2, seja válida. Conforme singletos são formados, sítios mais distantes passam a ser conectados por interações residuais, menores que as interações originais. Quando esta interação residual se tornar a maior escala de energia do problema, este par de sítios, inicialmente desconectado, formará um singleto. O estado fundamental formado está representado esquematicamente na Fig. 2.2. Note que as linhas que conectam pares de spins que formam singletos não se cruzam, consequência da estrutura das regras de dizimação.

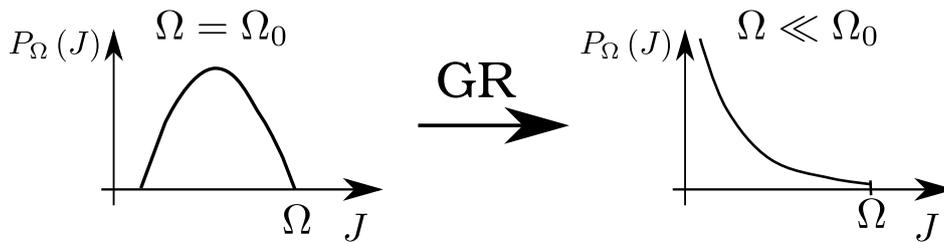


Figura 2.1: Representação do fluxo do grupo de renormalização. Uma distribuição arbitrária de acoplamentos flui, sob ação das transformações do grupo de renormalização, para a distribuição de acoplamentos de ponto fixo, dada pela equação (2.19).

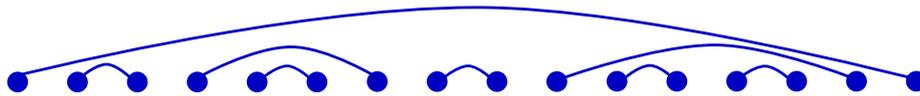


Figura 2.2: Representação esquemática da fase dos singletos aleatórios, onde pares de spins formam singletos.

## 2.4 Distribuição de acoplamentos

Olhando a distribuição de acoplamentos, podemos extrair observáveis que incluem propriedades do estado fundamental e de temperatura finita. Para isso, precisamos saber como a distribuição de acoplamentos é alterada conforme a escala de energia  $\Omega$  diminui quando as regras 1-4 da Seção 2.2 são implementadas. Chamemos de  $P_\Omega(J)$  a distribuição de acoplamentos quando a escala de energia é  $\Omega$ . Nesta seção, iremos mostrar analiticamente como determinar a forma desta distribuição. Para isso, é conveniente introduzirmos as variáveis logarítmicas

$$\xi = \ln\left(\frac{\Omega}{J}\right), \quad (2.7)$$

$$\Gamma = \ln\left(\frac{\Omega_0}{\Omega}\right), \quad (2.8)$$

onde  $\Omega_0$  é o valor de  $\Omega$  no início do fluxo. Note que  $\xi$  é definido no intervalo  $0 < \xi < \infty$  já que  $0 < J < \Omega$ . Note que  $\Gamma$  aumenta monotonicamente durante o fluxo. A grande vantagem de introduzir essas variáveis é que, se desprezamos o pré-fator de  $\tilde{J}_{1,4}$  (igual a  $\frac{1}{2}$  e irrelevante para desordem alta), a renormalização de  $\xi$  é aditiva,

$$\tilde{\xi}_{1,4} = \xi_1 + \xi_3. \quad (2.9)$$

Chamemos a distribuição de acoplamentos em termos de  $\xi$  e  $\Gamma$  de  $\rho(\xi, \Gamma)$ . Para estudar a forma de  $\rho$ , computamos a mudança sofrida por uma mudança  $d\Gamma > 0$  na escala de energia do problema:  $\Gamma \rightarrow \Gamma + d\Gamma$  e  $\xi \rightarrow \xi - d\Gamma$ . Por um lado,

$$\delta\rho = \frac{\partial\rho}{\partial\Gamma}d\Gamma - \frac{\partial\rho}{\partial\xi}d\Gamma, \quad (2.10)$$

e então,

$$\rho(\xi, \Gamma)|_{\Gamma=\Gamma+d\Gamma} = \rho(\xi, \Gamma) + \frac{\partial\rho}{\partial\Gamma}d\Gamma - \frac{\partial\rho}{\partial\xi}d\Gamma. \quad (2.11)$$

Por outro lado, tal variação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(\xi, \Gamma)|_{\Gamma=\Gamma+d\Gamma} &= \frac{1}{[1 - 2d\Gamma\rho(0, \Gamma)]} \left\{ \rho(\xi, \Gamma) + d\Gamma \int_0^\infty d\xi_1 \int_0^\infty d\xi_3 \rho(\xi_1, \Gamma) \rho(\xi_3, \Gamma) \times \right. \\ &\times \left. [\delta(\xi - \xi_1 - \xi_3) - \delta(\xi - \xi_1) - \delta(\xi - \xi_3)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

O primeiro termo do numerador do lado direito é a distribuição original, que é alterada pelo segundo termo, que contém uma delta de Dirac com sinal positivo centrada no novo acoplamento a ser introduzido pelo fluxo ( $\xi = \xi_1 + \xi_3$ ), além de duas deltas centradas nas constantes dizimadas ( $\xi_1$  e  $\xi_3$ ), com sinal negativo, já que essas são removidas da cadeia. O denominador toma conta da normalização: é retirado da normalização original o termo  $2d\Gamma\rho(0, \Gamma)$ , já que são removidas duas ligações com probabilidade  $d\Gamma\rho(0, \Gamma)$ .

Comparando as duas equações acima, integrando nas deltas centradas em  $\xi_1$  e  $\xi_3$  e cancelando o diferencial  $d\Gamma$ , chegamos a

$$\frac{\partial \rho}{\partial \Gamma}(\xi, \Gamma) = \frac{\partial \rho}{\partial \xi}(\xi, \Gamma) + \rho_0 \int_0^\infty d\xi_1 \int_0^\infty d\xi_3 \rho(\xi_1, \Gamma) \rho(\xi_3, \Gamma) \delta(\xi - \xi_1 - \xi_3), \quad (2.13)$$

$$= \frac{\partial \rho}{\partial \xi}(\xi, \Gamma) + \rho_0 \int_0^\xi d\xi_1 \rho(\xi_1, \Gamma) \rho(\xi - \xi_1, \Gamma). \quad (2.14)$$

Note que se trata de uma equação integro-diferencial não-linear. Apesar disso, a solução de ponto fixo pode ser encontrada analiticamente, conforme feito pioneiramente por Fisher [2]. Mostraremos, na sequência, qual o procedimento a se seguir.

## 2.5 Escalamento e solução da equação de fluxo

A distribuição  $\rho(\xi, \Gamma)$  é função de duas variáveis,  $\Gamma$  e  $\xi$ . Podemos começar procurando uma solução de escala. Para isso, definimos uma nova variável  $x = \frac{\xi}{\Gamma^\phi}$  cuja distribuição de probabilidade é  $Q(x)$ . Substituindo na equação de fluxo (2.13), encontramos que o expoente  $\phi$  que elimina a dependência explícita em  $\Gamma$  é

$$\phi = 1 \quad (2.15)$$

A equação que resta para a função  $Q(x)$  é

$$0 = (x+1)Q'(x) + Q(x) + Q(0) \int dx_1 \int dx_2 Q(x_1) Q(x_2) \delta(x_1 + x_2 - x). \quad (2.16)$$

O último termo do lado direito é uma convolução da função  $Q(x)$ , o que sugere que uma transformação de Laplace pode tornar a equação integro-diferencial algébrica. De fato, a solução dada pioneiramente por Fisher [2] começa pela transformada de Laplace. Um atalho para encontrar a solução é pensar em funções que não mudam por convolução e derivação. Uma possibilidade são as funções exponenciais. De fato, a solução é

$$Q(x) = e^{-x}. \quad (2.17)$$

Com isso,

$$\rho(\xi, \Gamma) = \frac{1}{\Gamma} e^{-\frac{\xi}{\Gamma}}. \quad (2.18)$$

Voltando às variáveis originais do problema e usando que  $P_\Omega(J) dJ = \rho(\xi, \Gamma) d\xi$ , encontramos a solução de ponto fixo

$$P^*(J, \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left( \frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad (2.19)$$

com  $\alpha = \frac{1}{\Gamma} = -\frac{1}{\ln \Omega}$ .

O valor médio e a variância da variável  $J$  são, respectivamente

$$\begin{aligned} \langle J \rangle &= \frac{\alpha}{\Omega} \int_0^\Omega dJ \left( \frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} J, \\ &= \frac{\alpha}{1+\alpha} \Omega. \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \text{Var} J = \sigma_J^2 &= \frac{\alpha}{\Omega} \int_0^\Omega dJ \left( \frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} J^2 - \left( \frac{\alpha}{\Omega} \int_0^\Omega dJ \left( \frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} J \right)^2, \\ &= \Omega^2 \left[ \frac{\alpha}{2+\alpha} - \left( \frac{\alpha}{1+\alpha} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

No limite  $\Omega \rightarrow 0$ ,  $\alpha \rightarrow 0$  e então

$$\begin{aligned}
 \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\text{Var}J}}{\langle J \rangle} &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{\left[ \frac{\alpha}{2+\alpha} - \left( \frac{\alpha}{1+\alpha} \right)^2 \right]^{1/2}}{\frac{\alpha}{1+\alpha}} \\
 &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left[ \left( \frac{1+\alpha}{\alpha} \right)^2 \frac{\alpha}{2+\alpha} - 1 \right]^{1/2} \\
 &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left[ \frac{1}{\alpha} \frac{(1+\alpha)^2}{2+\alpha} - 1 \right]^{1/2} \\
 &\approx \left( \frac{1}{\alpha} \right)^{1/2} \rightarrow \infty,
 \end{aligned}$$

e dizemos então que esta fase tem *desordem infinita*.

## 2.6 Propriedades físicas a partir da distribuição de ponto fixo

Começamos o cálculo de propriedades físicas com a determinação da relação entre energia e comprimento. Para tanto, trabalhamos com a variável  $n_\Omega$ , que é a densidade de spins quando o maior gap local é  $\Omega$  (ou, equivalentemente, o inverso da distância média entre spins). Como

$$\begin{aligned}
 dn_\Omega &= 2n_\Omega P(\Omega) d\Omega, \\
 \implies n_\Omega &\sim \frac{1}{(\ln 1/\Omega)}. \tag{2.20}
 \end{aligned}$$

Já que  $L_\Omega \sim n_\Omega^{-1}$ , chegamos a

$$\ln \Omega \sim -L^\psi, \tag{2.21}$$

onde  $\psi = \frac{1}{2}$  é o expoente de tunelamento.

O procedimento básico para determinar outras propriedades físicas é:

1. Dizimar spins, aplicando o grupo de renormalização, até que a escala de energia  $\Omega$  seja igual a temperatura  $T$ .
2. Considerar os spins não dizimados como sendo livres, ou seja, sem interação entre eles. Os spins dizimados são considerados inertes.

A justificativa de tal procedimento é simples: na escala de energia  $\Omega \sim T$  os estados excitados podem ser acessados e então a aplicação do método, de congelar spins em singletos, deixa de fazer sentido. Por outro lado, como estamos interessados na física de baixas temperaturas, quando a escala de energia passa a ser  $T \sim \Omega$ , a distribuição de probabilidade deve se encontrar próxima ao ponto fixo  $P(J) \approx P^*(J)$ , se  $\Omega_0 \gg T$ . Como a distribuição de ponto fixo é larga (comparada ao valor médio), então o erro cometido considerando os spins dizimados como congelados e os não dizimados como livres é negligenciável.

Vamos agora analisar a susceptibilidade magnética a baixas temperaturas, que está relacionada ao modo como o sistema responde a um campo externo. No caso em que  $\Omega \gg T$ , os spins, acoplados em pares de singletos, são poucos excitados por flutuações térmicas. Por outro lado, no limite oposto,  $\Omega \ll T$ , podemos considerar os spins livres, o que gera uma susceptibilidade do tipo Curie, que decai com o inverso da temperatura. Isso faz com que paremos a dizimação em  $\Omega \sim T$ , o que fornece

$$\chi \sim \frac{n_{\Gamma(T)}}{\Gamma} \sim \frac{1}{T \left[ \ln \left( \frac{1}{T} \right) \right]^2}. \tag{2.22}$$

Outras propriedades podem ser encontradas utilizando-se o mesmo argumento que aquele usado acima. A uma dada temperatura  $T$ , separa-se os spins entre livres, com acoplamentos menores que  $T$ , e pares de singletos, formados a escalas de energia  $\Omega$  maiores que  $T$ . Em particular, o calor específico e a entropia são dados por

$$S = k_B n_{\Gamma(T)} \log 2 \sim \frac{1}{\left( \ln \frac{1}{T} \right)^{\frac{1}{\psi}}}, \tag{2.23}$$

$$c = T \frac{dS}{dT} \sim \frac{1}{\left( \ln \frac{1}{T} \right)^{1+\frac{1}{\psi}}}. \tag{2.24}$$

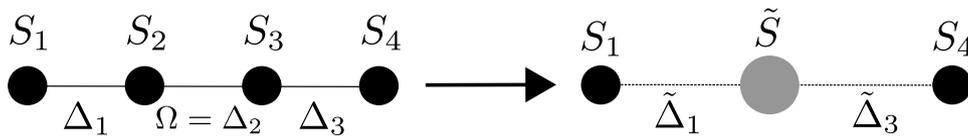


Figura 2.3: Processo de renormalização que leva à Large Spin Phase.

## 2.7 Outras fases relevantes

Passamos agora à descrição de outras fases encontradas pelo estudo de cadeias de spin desordenadas usando o SDRG, que serão encontradas nos capítulos seguintes.

### 2.7.1 “Large Spin Phase”

O procedimento básico do SDRG foi exemplificado para cadeia de spins 1/2 com ligações AF, por este ser o exemplo mais simples. Porém, o método pode ser generalizado levando-se também em conta a possibilidade de acoplamentos antiferromagnéticos e ferromagnéticos misturados. Para isso, a distribuição de probabilidade deve ter como domínio acoplamentos tanto de sinal positivo quanto negativo.

Não entraremos nos detalhes sobre a demonstração das regras de dizimação, já que estas correspondem a um caso especial do Hamiltoniano que trataremos no Capítulo 5. O processo de dizimação está representado esquematicamente na Fig. 2.3. Os spins que serão tratados perturbativamente são os vizinhos ao maior gap da cadeia  $\Omega = \Delta_2$ . Os gaps  $\Delta_i$  dependem de  $J_i$  e do valor dos spins vizinhos  $S_i$  e  $S_{i+1}$ .

O par de spins com maior gap, que aqui consideramos serem  $S_2$  e  $S_3$ , pode ser substituído por um spin efetivo  $\tilde{S}$ , caso o momento angular total do par de spins seja não nulo. Neste caso,  $\tilde{S}$  terá valor igual ao spin do multiplete do estado fundamental do par. Caso o momento angular total seja nulo, os dois spins são removidos da cadeia.

Em suma, o processo de dizimação se dá pelas regras seguintes:

- Caso o spin total  $\tilde{S}$  do par (que chamaremos de  $S_2$  e  $S_3$ , conectados por  $J_2$ ) não seja nulo, o tratamento é feito em primeira ordem de teoria de perturbação e as constantes de acoplamento vizinhas ao par serão renormalizadas por

$$\tilde{J}_1 = \frac{\tilde{S}(\tilde{S} + 1) + S_2(S_2 + 1) - S_3(S_3 + 1)}{2\tilde{S}(\tilde{S} + 1)} J_1, \quad (2.25)$$

$$\tilde{J}_3 = \frac{\tilde{S}(\tilde{S} + 1) + S_3(S_3 + 1) - S_2(S_2 + 1)}{2\tilde{S}(\tilde{S} + 1)} J_3, \quad (2.26)$$

enquanto um novo spin  $\tilde{S} = S$  será introduzido em substituição ao par de spins original.

- Caso o spin total  $\tilde{S}$  do estado fundamental do par  $S_2$  e  $S_3$  seja nulo, o tratamento é feito em segunda ordem de teoria de perturbação e um acoplamento efetivo entre os spins  $S_1$  e  $S_4$  é, dado por

$$\tilde{J}_{14} = \frac{2J_1 J_3 S_2 (S_2 + 1)}{3J_2}. \quad (2.27)$$

No limite de baixas energias verifica-se a formação de grandes aglomerados de spins. De fato, o tamanho do spin efetivo do aglomerado de spin efetivo  $S$  formado por  $l$  spins está relacionado com o tamanho original dos spins por

$$S = \left| \sum_{i=1}^l \mp S_i \right|, \quad (2.28)$$

sendo o sinal negativo quando os spins compartilham acoplamento FM e sinal positivo quando compartilham acoplamento AF. Como a posição dos acoplamentos FMs e AFs é aleatória, chegamos a um problema de passeio aleatório e conseqüentemente o spin médio se relaciona com a escala de energia por

$$S \sim L_\Omega^{1/2}. \quad (2.29)$$

O fato desses spins efetivos serem arbitrariamente grandes justifica o nome “Large Spin Phase”.

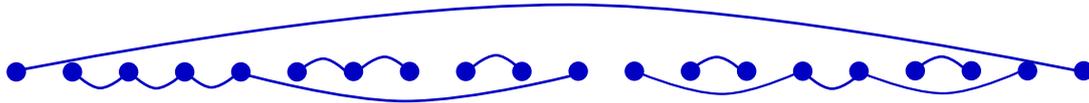


Figura 2.4: Representação do estado fundamental para Hamiltonianos com simetria  $SU(N)$ . Os singletos são formados por aglomerados de spins, cujos tamanhos dependem de  $N$ .

A distribuição local de gaps  $\Delta_i$  obedece a seguinte relação de escala [26]

$$\mathcal{Q}_1^*(\Delta, S) = \frac{x \mathcal{Q}_{AF}(\frac{\Delta}{\Omega}, \frac{S}{\Omega^\alpha}) + (1-x) \mathcal{Q}_{FM}(\frac{\Delta}{\Omega}, \frac{S}{\Omega^\alpha})}{\Omega^{1+2\alpha}}, \quad (2.30)$$

onde  $x$  é a fração de acoplamentos com  $J > 0$ . A relação entre energia e comprimento nessa fase é da forma

$$\Omega \sim L^{-z} \quad (2.31)$$

onde  $z = -1/(2\alpha) > 0$ . O expoente  $z$  é universal se a desordem é fraca (com valor aproximado  $z^* \approx 2,27$ ) e não universal e maior que  $z^*$  caso a desordem seja forte [26].

A entropia por spin pode ser calculada diretamente, em um sistema a temperatura  $T$

$$\sigma = \frac{\ln(2\langle S \rangle + 1)}{L_{\Omega=T}} \sim \frac{\ln L_\Omega}{L_{\Omega=T}} = \frac{\ln T}{T^{-\frac{1}{z}}} = -T^{\frac{1}{z}} \ln T \quad (2.32)$$

De maneira análoga, pode-se mostrar que a susceptibilidade magnética é do tipo Curie, se comportando como  $\chi \sim T^{-1}$  [26].

Por fim, mostraremos que no limite assintótico do fluxo a concentração de acoplamentos FM e AF deve ser não nula, se assim forem no início do fluxo, ou seja, que tanto a cadeia FM quanto a AF são instáveis no que se refere à introdução de acoplamentos de sinal oposto. Se  $J_2 > 0$  e os spins  $S_2$  e  $S_3$  não forem iguais, como o multipletto fundamental será de  $S = |S_2 - S_3|$ , então um dos acoplamentos vizinhos mudará de sinal, se tornando FM. Já na ligação FM, o multipletto fundamental é  $S = (S_2 + S_3)$  e nenhum dos acoplamentos vizinhos muda de sinal na dizimação do par. Logo, a dizimação do par FM preserva o sinal das vizinhanças, enquanto a dizimação do par AF inverte um dos sinais. Imaginemos uma ligação AF numa cadeia FM: se essa ligação AF for dizimada, haverá produção de uma vizinha AF substituindo a dizimada, enquanto se uma ligação FM for dizimada, as vizinhanças mantêm-se FM. A introdução de uma ligação FM em uma cadeia AF prolifera as ligações FM já que a dizimação de ligações AF transforma uma vizinha em FM.

### 2.7.2 Fase de singletos aleatórios de Hamiltonianos com Simetria $SU(N)$

Para cadeias de spin para as quais o Hamiltoniano tem simetria  $SU(N)$  há algumas alterações em relação ao que encontramos na Seção 2.6 (para uma introdução ao grupo  $SU(N)$ , convidamos o leitor ao Apêndice B). O estado fundamental AF passa a ser uma coleção de conjuntos de spins, sendo que no interior de cada conjunto os spins são fortemente correlacionados, enquanto conjuntos diferentes interagem fracamente entre si. O número médio de spins em um conjunto depende somente de  $N$ . Para  $N = 2$  retomamos o caso anterior, com conjuntos formados por pares de spins. Já quando  $N > 2$  o número médio de spins em um conjunto  $\langle N_s \rangle$  aumenta com  $N$ , sendo  $\langle N_s \rangle = N$ . Dessa maneira, a generalização para o grupo  $SU(N)$  é feita considerando que a diminuição da escala de energia, que vem da dizimação de segunda ordem, ocorrerá quando  $N$  spins, em média, forem dizimados, ou seja,  $\frac{1}{\psi} = \langle N_s \rangle = N$ . A representação esquemática do estado fundamental dessa fase é feita na Fig. (2.4).

A equação de fluxo agora é [21]

$$\frac{\partial \rho}{\partial \Gamma}(\xi, \Gamma) = \frac{\partial \rho}{\partial \xi}(\xi, \Gamma) + q\rho_0\rho(\xi, \Gamma) + p\rho_0 \int_0^\infty d\xi_1 \int_0^\infty d\xi_3 \rho(\xi_1, \Gamma) \rho(\xi_3, \Gamma) \delta(\xi - \xi_1 - \xi_3). \quad (2.33)$$

Comparando com a Eq. (2.13), vemos as seguintes mudanças:

(i) O termo de convolução é ponderado por um pré-fator  $p < 1$ , que corresponde à fração de dizimações de segunda ordem

(ii) Um termo adicional  $q\rho_0\rho(\xi, \Gamma)$  é incluído. Tal termo é oriundo das dizimações de primeira ordem, que ocorrem com probabilidade  $q = 1 - p$ .

Para esse caso, não convém repetir todos os passos que fizemos na solução de Fisher do Hamiltoniano de Heisenberg. Usando diretamente o Ansatz  $\rho(\xi, \Gamma) = \tilde{\rho}(\Gamma) e^{-\tilde{\rho}\xi}$  na Eq. (2.33), encontramos a solução de ponto fixo dada por [21]

$$\rho^*(\xi, \Gamma) = \frac{1}{p\Gamma} e^{-\frac{\xi}{p\Gamma}} \quad (2.34)$$

Em termos da variável  $J$ , temos

$$P^*(J, \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left( \frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha_p} \theta(\Omega - J). \quad (2.35)$$

onde  $\alpha_p = -\frac{1}{p} \frac{1}{\ln \Omega}$ .

Podemos calcular novamente a relação entre comprimento e energia,

$$dn_\Gamma = -(2p + q) n_\Gamma \rho(0, \Gamma) d\Gamma.$$

Integrando a equação, chegamos a

$$n_\Gamma \sim \Gamma^{-\frac{1}{\psi}} \quad (2.36)$$

onde definimos

$$\psi = \frac{p}{1+p}. \quad (2.37)$$

Note que mesmo quando o problema não tem simetria aumentada é possível que o expoente  $\psi$  da RSP não seja  $\frac{1}{2}$ . Para ver isso, suponhamos que, por qualquer que seja a razão, no regime assintótico do fluxo uma fração  $p$  das dizimações seja feita em segunda ordem de teoria de perturbação enquanto uma fração  $q = 1 - p$  seja feita em primeira ordem. Isso é equivalente a precisar em média de  $\frac{1}{p} + 1$  spins para realizar uma dizimação de segunda ordem e, com isso,  $\psi = \frac{1}{1+\frac{1}{p}} = \frac{p}{1+p}$ . Voltaremos a este ponto no Capítulo 5.

## 2.8 Conclusões

Neste Capítulo, introduzimos a técnica do SDRG, assim como algumas das fases encontradas em sistemas de spins, tanto com fases antiferromagnéticas quanto com fases onde o spin aumenta de tamanho em baixas energias. Nos próximos Capítulos, aplicaremos a técnica em sistemas de nosso interesse e mostraremos que, além de propícia para achar estados fundamentais e de baixas energias, o SDRG também oferece uma rota para determinar a emergência de simetrias em sistemas desordenados.

## Capítulo 3

# Emergência de simetria $SU(3)$ em cadeias de spin 1 desordenadas

### 3.1 Introdução: simetrias emergentes

Simetrias constituem um ingrediente fundamental na nossa descrição do mundo físico. No modelo padrão das partículas elementares, a simetria de gauge é o princípio organizador, restringindo fortemente a forma das equações microscópicas [41]. Em sistemas de matéria condensada, simetrias desempenham um papel crucial na classificação das várias fases da matéria, assim como na classificação das transições entre fases [42]. Simetrias podem ser completamente ou parcialmente destruídas em baixas energias pelo mecanismo de *quebra espontânea de simetria*, um tema familiar tanto em física de altas energias (por exemplo, na quebra da simetria eletrofraca) como em física de matéria condensada (por exemplo, nas várias fases magnéticas e em supercondutividade). Nas fases nas quais a simetria é quebrada, a quebra de simetria desempenha também um papel fundamental no espectro de excitações de baixas energias (bósons de Goldstone, quase-partículas, etc).

Um tema muito menos explorado é o aumento da simetria do sistema em baixas energias. Um dos primeiros sinais de tais *simetrias emergentes* foi encontrado na região crítica da cadeia de Ising em um campo magnético transversal, onde mostrou-se que o espectro é governado pelo grupo de Lie  $E_8$  [43], o que mais tarde foi confirmado experimentalmente [44]. Outros sistemas onde este fenômeno foi proposto incluem tanto pontos críticos [20, 45, 46], cujo acesso depende de um ajuste fino dos parâmetros, quanto fases estendidas [47, 30, 22, 48]. Algumas propostas para simuladores quânticos de teorias de gauge em redes de átomos frios dependem de uma simetria de gauge, também emergente [49].

Mesmo à luz dos exemplos acima, não é conhecido um mecanismo genérico para a emergência de simetrias. Há sugestões de que estas simetrias surgem quando o estado fundamental do sistema total é formado por uma coleção de subsistemas acoplados por termos que quebram uma simetria em altas energias, mas que são irrelevantes (no sentido de Grupo de Renormalização) para a descrição de baixas energias [30, 31]. A simetria emergente corresponde, portanto, à simetria presente em cada subsistema, que passa a ser a simetria global de baixas energias.

Neste Capítulo, nós mostramos que a desordem também pode levar a um desacoplamento do estado fundamental, acompanhado de uma simetria emergente global. Cadeias antiferromagnéticas de spin 1 com simetria  $SU(2)$  são caracterizadas, em baixas energias, por uma *simetria  $SU(3)$  emergente*. A emergência da simetria  $SU(3)$  pode ser evidenciada pelas funções resposta, como susceptibilidades e funções de correlação de operadores de  $SU(3)$  apropriadamente definidos (dipolos e quadropolos de spin), que são governados por expoentes universais de  $SU(3)$ . Nossos resultados sugerem uma visualização da física de baixas energias na qual o sistema se comporta como uma coleção de objetos desacoplados [30, 31]: “quarks” e “antiquarks” de  $SU(3)$ , livres, além de “mésons” ou “bárions” (dependendo da fase), ligados. O leitor interessado em estabelecer a analogia entre os resultados para cadeias de spin e a linguagem de física de partículas é convidado a ler o Apêndice C. Nossos resultados destacados neste Capítulo foram publicados em [32].

A simetria  $SU(3)$  emergente na cadeia de spin 1 é identificada em regiões finitas do diagrama de fases, e *não requer* ajuste fino para ser encontrada. Como ficará evidente neste Capítulo, nosso resultado, o estudo da cadeia de spin 1 delimita uma rota *genérica* para o encontro de simetrias emergentes em sistemas desordenados.

Esse Capítulo é organizado da seguinte maneira: na Seção 3.2, introduzimos o modelo estudado e na Seção 3.3 revisamos o diagrama de fases deste problema no caso sem desordem. Posteriormente, na Seção 3.4 trabalhamos a física do problema da cadeia de dois spins, básico para o procedimento de SDRG desenvolvido na Seção 3.5. Os resultados do fluxo são discutidos nas Seções 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9. Na Seção 3.10, discutimos a emergência de simetria  $SU(3)$  neste sistema. Finalmente, encerramos com as conclusões na Seção 3.11.

## 3.2 Modelo

Consideramos o Hamiltoniano da cadeia de spin 1 mais genérica, invariante sob ação do grupo SU(2) e reversão temporal, cujo Hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[ J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right], \quad (3.1)$$

onde  $J_i$  e  $D_i$  são variáveis aleatórias independentes. Além de interesse em matéria condensada, esse Hamiltoniano é relevante em sistemas de átomos frios, onde os acoplamentos, a dimensionalidade e o grau de desordem podem ser controlados com considerável flexibilidade [50, 51].

Estudaremos esse modelo desordenado por uma implementação do SDRG, conforme introduzido no Capítulo 2, e cujas regras detalhadas para este caso serão introduzidas na próxima Seção. Se mostrará útil trabalhar com variáveis angulares, definidas como  $\tan \theta_i = \frac{D_i}{J_i}$ . Em termos destas, o Hamiltoniano é reescrito como

$$\mathcal{H} = \sum_i J_i \left[ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \tan \theta_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right], \quad (3.2)$$

Para definir um ângulo qualquer no diagrama de fases usaremos, dependendo do caso,  $\tan \theta_i$  e o sinal de um dos acoplamentos,  $J_i$  ou  $D_i$ , ou o ângulo  $\theta_i$ , explicitamente.

## 3.3 Caso sem desordem

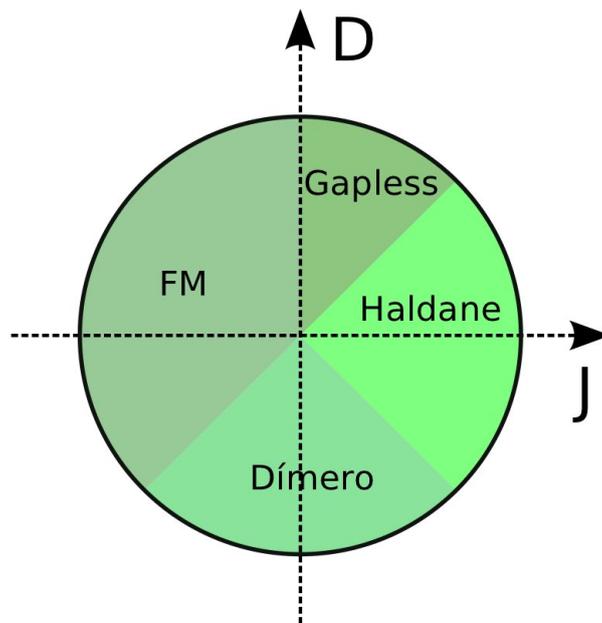


Figura 3.1: Diagrama de fases para o caso sem desordem.

Antes de tratar o caso desordenado, consideremos o caso sem desordem, em que  $J_i = J$  e  $D_i = D$ . O rico diagrama de fases do sistema deste caso foi estudado anteriormente em detalhes (para maiores detalhes ver Ref. [52] e as referências lá incluídas). As fases encontradas estão mostradas na Figura 3.1. Há uma fase ferromagnética convencional quando  $\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{5\pi}{4}$ , o sistema é gapeado se  $-\frac{3\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$  e crítico quando  $\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{2}$ . Para  $-\frac{3\pi}{4} < \theta \leq -\frac{\pi}{4}$ , o estado fundamental é espontaneamente dimerizado. A fase de Haldane se estende de  $-\frac{\pi}{4}$  a  $\frac{\pi}{4}$ .

Alguns pontos do diagrama de fase merecem atenção especial. O ponto  $\tan \theta = \frac{1}{3}$ , com  $J > 0$ , é o chamado ponto de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT). Nele, o estado fundamental é conhecido exatamente [53]. Cada spin 1 é representado por dois spins  $S = \frac{1}{2}$  simetrizados, e a função de onda AKLT é aquela na qual existe um singleto em cada ligação entre os dois spins  $\frac{1}{2}$ . Esta função de onda também é chamada de VBS (do inglês “Valence bond solid”), em alusão à semelhança com um sólido de valência. A representação esquemática desse estado encontra-se na Fig. 3.2. Além deste ponto, merecem destaque o ponto crítico  $\theta = -\frac{\pi}{4}$  e os quatro pontos onde o Hamiltoniano apresenta simetria SU(3) explícita (isto é, independente da escala de energia), que são  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\theta = \pm \frac{\pi}{2}$  e  $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ .

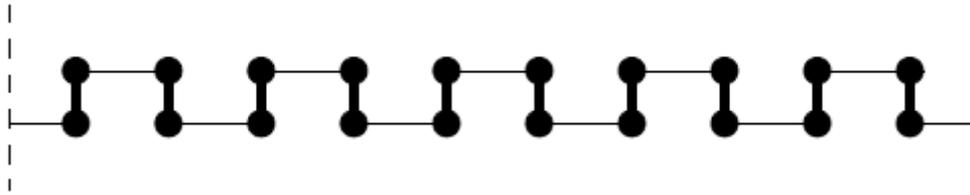


Figura 3.2: Função de onda VBS onde spins 1 são representados pela simetrização de dois spins  $\frac{1}{2}$ . As linhas horizontais representam singletos de spins  $\frac{1}{2}$  formados em sítios adjacentes.

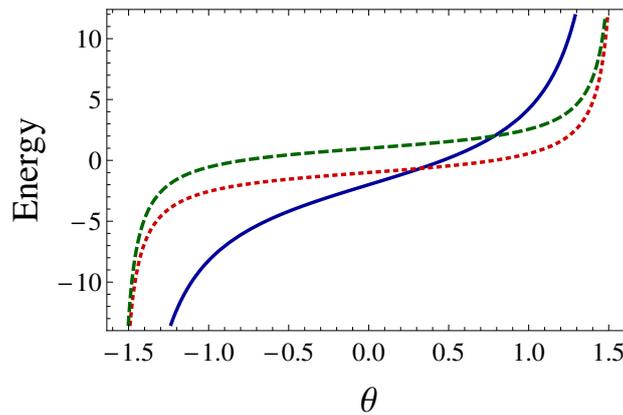


Figura 3.3: Níveis de energia para um par de spins iguais a 1, em termos de  $\theta$  (ver Eq. (3.2)). Em azul, a energia do singlete. Em vermelho, o triplete ( $\tilde{S} = 1$ ) e em verde o quintuplete ( $\tilde{S} = 2$ ).

### 3.4 Problema de dois spins

Passamos agora ao tratamento do problema de dois spins, o que se mostrará útil para posteriormente encontrarmos as regras de SDRG para spins e acoplamentos quaisquer. O Hamiltoniano para o problema de dois spins, que chamaremos de  $S_2$  e  $S_3$ , é dado por

$$\mathcal{H}_{2spins} = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + D_2 (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)^2 \quad (3.3)$$

É óbvio que trata-se de um Hamiltoniano invariante por rotações, já que os termos presentes são potências do produto escalar de dois spins. Portanto, a base da soma do momento angular dos dois spins  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$ , cujos autoestados são  $|S, M\rangle$ , diagonaliza o problema. A menos de um termo constante, que corresponde a um deslocamento global da energia, chegamos ao espectro dado por

$$E(S, S_2, S_3) = J_2 \left[ \frac{S(S+1)}{2} + \tan \theta_2 \frac{\left\{ S^2 (S+1)^2 - 2[S_2(S_2+1) + S_3(S_3+1)]S(S+1) \right\}}{4} \right]. \quad (3.4)$$

Dados o sinal de  $J_2$  e o valor de  $\tan \theta_2$ , o estado fundamental será determinado pelo valor  $\tilde{S} = S$  que minimiza ou maximiza a expressão entre colchetes. Tal valor de  $\tilde{S}$  também é essencial para determinar o passo de dizimação, que é o que faremos na sequência. Assumindo  $J_2 > 0$ , os três níveis são graficados na Figura 3.3, como função do ângulo  $\theta$ .

Munidos do espectro e dos autoestados do problema de dois spins, passamos agora ao cálculo do passo do SDRG.

### 3.5 Procedimento de Grupo de Renormalização

Para calcular as propriedades físicas do sistema, usaremos o procedimento de SDRG introduzido no Capítulo 2, aplicado para o Hamiltoniano da Eq. (3.1). Para tanto, é necessário estudar o problema de 4 spins, que rotularemos com índices  $i$ , sendo  $i = 1, \dots, 4$ . Consideramos o par mais fortemente acoplado como sendo aquele formado pelos spins  $S_2$  e  $S_3$ , de forma que

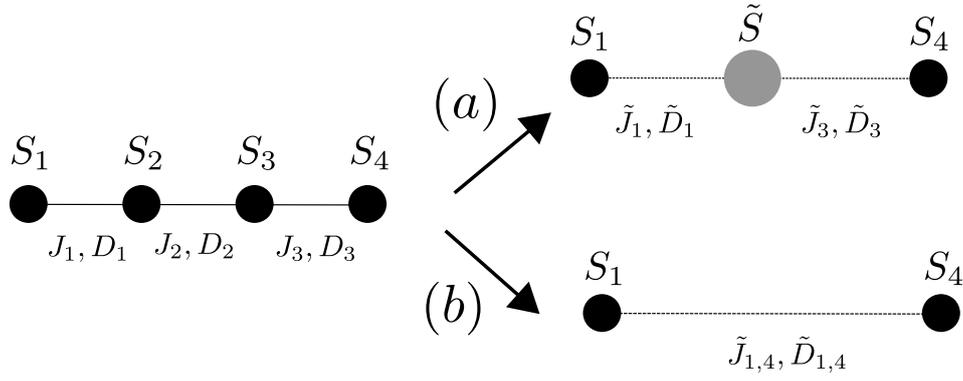


Figura 3.4: Representação esquemática da teoria de perturbação para o Hamiltoniano com acoplamentos bilineares e biquadráticos.

$$\mathcal{H}_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + D_2 (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)^2 \quad (3.5)$$

é o Hamiltoniano não perturbado, e a perturbação é

$$\mathcal{H}_{pert} = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + D_1 (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + D_3 (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4)^2. \quad (3.6)$$

As relações de recorrência do GR estão representadas esquematicamente na Fig. 3.4. Se o estado fundamental é um singlete ( $-\frac{3\pi}{4} < \theta_2 < \arctan \frac{1}{3}$ ), ambos spins são removidos da cadeia e um novo acoplamento entre os spins  $S_1$  e  $S_4$  é gerado, cujo valor é dado por

$$\tilde{J}_{1,4} = \frac{(2J_1 - D_1)(2J_3 - D_3)}{3(J_2 - 3D_2)} - \frac{D_1 D_3}{9(J_2 - D_2)}, \quad \tilde{D}_{1,4} = -\frac{2D_1 D_3}{9(J_2 - D_2)} \quad (3.7)$$

O modo exato como as novas constantes de acoplamento são encontradas é análogo àquele feito no Apêndice A. No Capítulo 5, detalharemos como encontrar estas regras, cuja derivação é simples usando a linguagem de Tensores Esféricos Irredutíveis, a serem introduzidos no Capítulo 4.

Se o estado fundamental é um tripleto ( $\arctan \frac{1}{3} < \theta_2 < \frac{\pi}{2}$ ), o par de spins deve ser substituído por um novo spin,  $\tilde{S} = 1$ , acoplado com  $S_1$  e  $S_4$  por

$$\tilde{J}_i = \frac{1}{2} (J_i - D_i), \quad \tilde{D}_i = -\frac{1}{2} D_i. \quad (3.8)$$

sendo  $i = 1, 3$ . Finalmente, se o estado fundamental for um quintupeto, o novo par de spins é substituído por um grau de liberdade correspondente a um spin  $\tilde{S} = 2$  e as novas constantes de acoplamento são necessárias. Os detalhes de como mostrar essas regras para multipletos de spins maiores são deixados para o Capítulo 5.

Devemos mencionar que existe uma combinação de  $J_i$  e  $D_i$  que permite uma simplificação na análise do fluxo:

$$K_i = J_i - \frac{D_i}{2}. \quad (3.9)$$

Tal combinação é conveniente já que  $K_i$  é a constante de acoplamento natural quando o Hamiltoniano é escrito em termos de Tensores Esféricos Irredutíveis [54, 55]. Por enquanto, seguiremos com as variáveis  $J$  e  $D$ , mas voltamos a este tópico de Tensores Esféricos Irredutíveis no Capítulo 4.

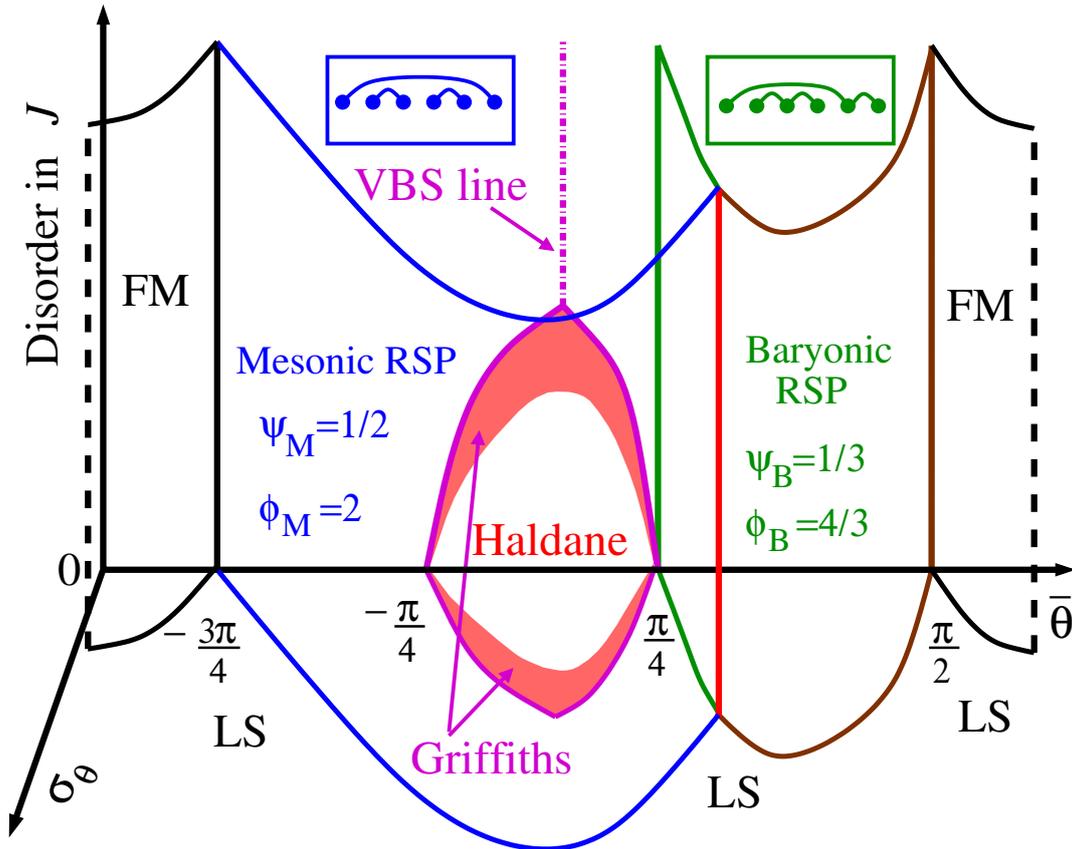


Figura 3.5: Diagrama de fases da cadeia de spin 1 com acoplamentos aleatórios. O ângulo  $\theta$  é definido pela razão entre acoplamentos biquadráticos e bilineares,  $\tan \theta_i = \frac{D_i}{J_i}$ . As linhas sólidas representam transições contínuas. A fase de Haldane é caracterizada por um gap finito e ordem topológica. Em vermelho (sombreado) a região de Griffiths, onde o gap é zero, mas a ordem topológica ainda existe. No regime de desordem forte, há uma fase de singletos aleatórios “mesônica” e uma fase de singletos aleatórios “bariônica” (ver Apêndice C para uma introdução à Física de Partículas). Na fase “bariônica”, os singletos são formados majoritariamente por trios de spins. Ainda representados esquematicamente no topo da Figura, os estados fundamentais de singletos aleatórios de ambas as fases. LS e FM são abreviações para as fases “Large Spin Phase” e Ferromagnética.



### 3.6.1 Pontos fixos com simetria SU(3)

Nesta Seção, mostramos que os pontos  $\theta_i = \frac{\pi}{4}$  e  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$  são pontos fixos de simetria SU(3). O fato destes serem pontos fixos será ingrediente fundamental para o entendimento da simetria *emergente* SU(3) em outras regiões do espaço de parâmetros, o que analisaremos na Seção 3.10. O leitor é convidado a ler o Apêndice B para um introdução ao grupo SU(N).

Começamos escrevendo explicitamente os 8 geradores do grupo SU(3) na representação definidora, que também chamamos de representação “quarkônica”, em termos de operadores de spin 1 (no Apêndice C é feita uma revisão dos conceitos de partículas elementares que usamos). Os vetores cartesianos  $S_\mu$  e os operadores tensoriais de ordem 2, que são  $T_{\mu\nu} = S_\mu S_\nu + S_\nu S_\mu$  ( $\mu, \nu = x, y, z$ ) formam um conjunto completo de 9 elementos que gera o espaço de matrizes Hermitianas  $3 \times 3$ . Os geradores do grupo SU(3) são as 8 matrizes Hermitianas *sem traço*. Uma escolha que se mostra conveniente neste caso é

$$\Lambda_1 = -S_x, \quad (3.10)$$

$$\Lambda_2 = S_y, \quad (3.11)$$

$$\Lambda_3 = -S_z, \quad (3.12)$$

$$\Lambda_4 = S_x S_y + S_y S_x, \quad (3.13)$$

$$\Lambda_5 = -S_x S_z - S_z S_x, \quad (3.14)$$

$$\Lambda_6 = S_y S_z + S_z S_y, \quad (3.15)$$

$$\Lambda_7 = -S_x^2 + S_y^2, \quad (3.16)$$

$$\Lambda_8 = -\frac{1}{\sqrt{3}} (2S_z^2 - S_x^2 - S_y^2). \quad (3.17)$$

Em termos desses geradores, o termo de Heisenberg é obviamente linear, enquanto o termo quadrático pode ser reescrito como

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}')^2 = \frac{4}{3} - \frac{1}{2} \sum_{a=1}^3 \Lambda_a \Lambda'_a + \frac{1}{2} \sum_{a=4}^8 \Lambda_a \Lambda'_a. \quad (3.18)$$

O Hamiltoniano para dois spins adjacentes, em termos do ângulo  $\theta$  é dado, portanto, por

$$H(\theta) = \cos \theta \mathbf{S} \cdot \mathbf{S}' + \sin \theta (\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}')^2 \quad (3.19)$$

$$= \frac{4}{3} \sin \theta + \left( \cos \theta - \frac{1}{2} \sin \theta \right) \sum_{a=1}^3 \Lambda_a \Lambda'_a + \frac{1}{2} \sin \theta \sum_{a=4}^8 \Lambda_a \Lambda'_a. \quad (3.20)$$

cuja invariância SU(3) em  $\theta = \frac{\pi}{4}$  é óbvia.

O outro ponto invariante por transformações SU(3) é  $\theta = -\frac{\pi}{2}$ . Para mostrarmos isto, começamos escrevendo o Hamiltoniano de um par de spins como

$$H\left(\theta = -\frac{\pi}{2}\right) = -(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}')^2 \quad (3.21)$$

$$= -\frac{4}{3} + \frac{1}{2} \sum_{a=1}^3 \Lambda_a \Lambda'_a - \frac{1}{2} \sum_{a=4}^8 \Lambda_a \Lambda'_a. \quad (3.22)$$

Para tornar a simetria SU(3) do Hamiltoniano explícita, nós primeiro notamos que a representação antiquark, que é a complexa conjugada da quarkônica, é obtida aplicando a seguinte prescrição para as matrizes geradoras

$$(\Lambda_a)_{ij} \rightarrow -(\Lambda_a)_{ij}^*. \quad (3.23)$$

Sob essa operação, e assumindo que estamos trabalhando na base em que  $S_z$  é real e diagonal, obtemos

$$\Lambda_1 \rightarrow S_x, \quad (3.24)$$

$$\Lambda_2 \rightarrow S_y, \quad (3.25)$$

$$\Lambda_3 \rightarrow S_z, \quad (3.26)$$

$$\Lambda_4 \rightarrow S_x S_y + S_y S_x, \quad (3.27)$$

$$\Lambda_5 \rightarrow S_x S_z + S_z S_x, \quad (3.28)$$

$$\Lambda_6 \rightarrow S_y S_z + S_z S_y, \quad (3.29)$$

$$\Lambda_7 \rightarrow S_x^2 - S_y^2, \quad (3.30)$$

$$\Lambda_8 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} (2S_z^2 - S_x^2 - S_y^2). \quad (3.31)$$

Uma representação equivalente àquela mostrada nas equações (3.10)-(3.17) é obtida se fizermos uma rotação de  $\pi$  ao redor do eixo  $y$ :  $S_x \rightarrow -S_x$ ,  $S_z \rightarrow -S_z$ . Uma vez aplicada essas transformações, encontramos

$$\tilde{\Lambda}_a = \Lambda_a \quad (a = 1, 2, 3), \quad (3.32)$$

$$\tilde{\Lambda}_a = -\Lambda_a \quad (a = 4, 5, 6, 7, 8). \quad (3.33)$$

onde denotamos a representação de antiquark por um  $\tilde{\Lambda}_a$ . Das equações (3.22) e (3.32)-(3.33), vemos que o ponto  $\theta = -\frac{\pi}{2}$  acopla sites vizinhos pertencentes às representações de quark e antiquark

$$H\left(\theta = -\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{4}{3} + \frac{1}{2} \sum_{a=1}^8 \Lambda_a \tilde{\Lambda}'_a. \quad (3.34)$$

Note, adicionalmente, que os pontos FM  $\theta = -\frac{3\pi}{4}$  e  $\theta = \frac{\pi}{2}$  também apresentam invariância global SU(3), já que

$$H\left(\theta = \frac{\pi}{2}\right) = -H\left(\theta = -\frac{\pi}{2}\right), \quad (3.35)$$

$$H\left(\theta = \frac{3\pi}{4}\right) = -H\left(\theta = \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.36)$$

O Hamiltoniano nestes pontos pode ser reescrito como

$$H = \sum_i \sum_{a=1}^8 C_i \Lambda_{a,i} \cdot \Lambda_{a,i+1} + \text{const.} \quad (3.37)$$

sendo  $\Lambda_{a,i}$  ( $a = 1, \dots, 8$ ) os geradores de uma representação irredutível (fundamental ou anti-fundamental) de SU(3). Quando  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$ , temos  $C_i = \frac{|D_i|}{2}$  e a representação é a fundamental (de quark) nos sítios ímpares, enquanto nos sítios pares a representação é a anti-fundamental (de antiquarks). Conforme mostrado no tratamento de cadeias antiferromagnéticas com invariância SU(N) na Ref. [21], o ponto fixo  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$  é caracterizado somente pela formação de singletos, ou um méson, na linguagem da QCD. Note que a alternância de quarks e antiquarks na cadeia é preservada pelo fluxo. Então, o tipo de fase é o mesmo que as fases de singletos aleatórios dos pontos fixos (1) e (2) acima. Chamaremos, portanto, de estado de singletos aleatórios mesônico e enumeraremos como sendo o ponto fixo (7).

Quando  $\theta_i = \frac{\pi}{4}$ , a representação é do tipo quark em cada sítio (representação fundamental de SU(3)) e  $C_i = J_i/2$ . A dizimação de uma ligação com  $\frac{\pi}{4}$  faz com que a ligação adjacente se transforme em uma ligação com  $-\frac{\pi}{2}$ , de acordo com a Eq. (3.8) (ver Fig 3.7a para uma lista das dizimações que ocorrem neste caso). Nos primeiros estágios do fluxo há, então, uma proliferação de ligações com  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$ . Dizimações posteriores com  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$  levam a um estado de singleto de spin e a um ângulo adjacente com  $-\frac{\pi}{2}$ , se  $\theta_{i-1} = \theta_{i+1}$ , ou  $\frac{\pi}{4}$ , se  $\theta_{i-1} \neq \theta_{i+1}$ , conforme mostrado nas Eqs. (3.7) e (3.8) e representado na Fig 3.7 pelas dizimações marcadas como *b*), *d*) e *e*). O fluxo do GR neste ponto fixo, que enumeramos como (8), é caracterizado por frações iguais de ligações com  $\theta_i = \frac{\pi}{4}$  e  $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$ . Enfatizamos novamente que esta é a única situação estável: qualquer outra fração de ligações fluiria para frações iguais de ambos ângulos, assintoticamente. Na linguagem de SU(3), dois quarks originais se ligam para formar um antiquark efetivo [21], com a regra de formação de acoplamentos dada na Eq. (3.8), onde um spin efetivo igual a 1 é formado. Este antiquark posteriormente se liga a um terceiro quark para formar um singleto. Efetivamente, este singleto é formado pelos três antiquarks originais, assim como um bárion é formado por três quarks. De maneira geral, singletos com mais de três spins (em múltiplos de 3) também podem ser formados, mas, conforme mostrado na Ref. [21], a ocorrência de tais singletos é rara. O estado fundamental originado dessa coleção de spins é representado esquematicamente na Fig. 3.8.

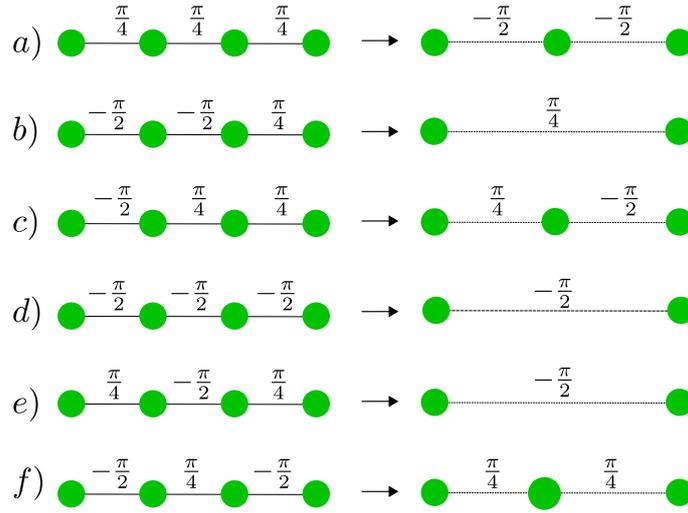


Figura 3.7: Seis tipos de dizimações de ângulo no caso de  $\theta_i = \frac{\pi}{4}$ , onde o Hamiltoniano apresenta simetria SU(3). Inicialmente, as dizimações são do tipo a), enquanto assintoticamente, os 6 tipos de dizimação são equiprováveis.

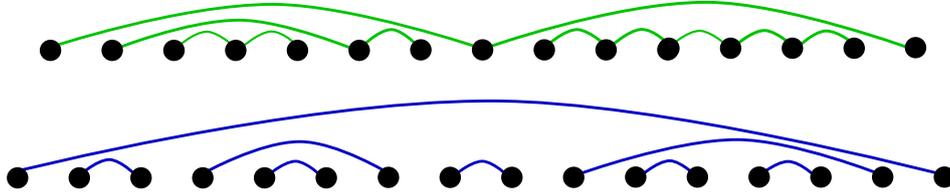


Figura 3.8: Comparação dos estados de singletos aleatórios quando este é formado por uma coleção de singletos de trios de spins ou, mais raramente, números maiores de spins, múltiplos de três (verde), em contraste com o caso em que é formado por singletos de dois spins (azul).

Note que a estrutura desse ponto fixo é a mesma daquele descrito como **(3)** acima, mesmo que os ângulos e os acoplamentos não sejam os mesmos. Chamamos este estado de estado de singletos aleatórios bariônico. Estes quatro pontos fixos instáveis são representados como estrelas brancas na Figura. 3.6. Por simplicidade, assim como no caso **(3)**, representamos o caso **(8)** por uma única estrela no primeiro quadrante, mas enfatizamos novamente que o ponto fixo envolve acoplamentos também no terceiro quadrante.

### 3.7 Diagrama de fases

Vamos agora descrever em detalhes as propriedades físicas das várias fases. Os resultados listados nessa Seção foram verificados numericamente, e os dados correspondentes serão mostrados na próxima Seção.

A identificação de todos os pontos fixos e sua estabilidade permite a descrição das bacias de atração para distribuições iniciais de ângulo fixo  $\theta_i = \theta_0$ , para todo  $i$  (ou seja, desvio padrão inicial  $\sigma_\theta$  é nulo) e no regime de validade da teoria de perturbação, que é o de desordem alta. O resultado dos fluxos é mostrado com arcos coloridos na circunferência da Figura 3.6. As setas vermelhas mostram a direção do fluxo, com a sutileza de que o fluxo no ponto fixo **(3)** (arco verde) também envolve ligações na região  $-\frac{3\pi}{4} < \theta \leq -\frac{\pi}{2}$ .

Em toda a região  $-\frac{3\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$  (arco azul da Figura 3.6), todas as dizimações levam, após um transiente inicial, à formação de singletos cujas distâncias médias aumentam durante o fluxo, com a característica de sempre serem formados por pares de spins, ou seja, não haver formação de singletos de trios de spin. O estado fundamental é análogo à fase de singletos aleatórios da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spin 1/2 [2] (ver Capítulo 2). O fluxo é atraído por um dos dois pontos fixos estáveis **(1)** ou **(2)**. Já que a estrutura destes é a mesma que do ponto fixo instável de simetria SU(3), ponto fixo **(7)**, descrevemos toda a região como sendo uma fase de singletos aleatórios mesônica. As propriedades de tal fase também foram detalhadamente descritas no Capítulo 2. Em resumo, as escalas de energia  $\Omega$  e o comprimento médio  $L$  das excitações obedecem a relação  $\ln \Omega \sim -L^\psi$  com um expoente universal  $\psi = \psi_M = \frac{1}{2}$  e a susceptibilidade diverge como  $\chi \sim 1/(T |\ln T|^{1/\psi})$ , enquanto o calor específico  $c \sim |\ln T|^{-(1+1/\psi)}$  conforme  $T \rightarrow 0$ . As correlações típicas de spin-spin no estado fundamental se anulam como  $\sim \exp(-\text{const} \times |i-j|^\psi)$ , como consequência da

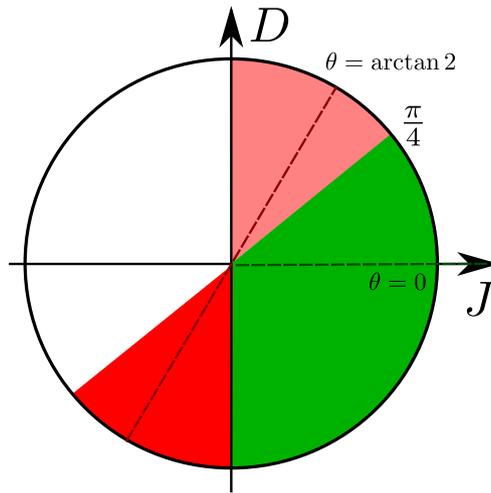


Figura 3.9: Regiões fechadas sob fluxo do SDRG. Em vermelho, a região  $1 \leq \tan \theta \leq \infty$ . Em tom mais escuro, o caso de  $J < 0$ , que só gera outros  $J$  também negativos. Em tom mais claro,  $J > 0$ , cujo ponto fixo envolve os dois sinais de  $J$ . Em verde, a região de singletos, que também é fechada sob fluxo do GR. Os pontos fixos são  $\theta = \arctan 2$ , na região vermelha, e  $\theta = 0$ , na região verde. As linhas tracejadas simbolizam os pontos fixos.

natureza localizada da fase, enquanto as correlações médias são dominadas por singletos de spin e se anulam algebricamente  $\sim e^{iq(i-j)} |i-j|^{-\phi}$  com  $q = q_M = \pi$  e um expoente universal  $\phi = \phi_M = 2$ . A diferença entre dois pontos fixos está relacionada à natureza de suas excitações. Para  $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{4}$ , as excitações mais baixas de um par de singletos têm spin 1, enquanto para  $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{2}$ , as excitações têm spin 2. No ponto fixo simétrico por transformações SU(3) (ponto fixo **(7)**), os dois tipos de excitações se degeneram e se tornam análogas aos octupletos mesônicos da QCD.

Na região  $\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{2}$ , representada pelo arco verde da Figura 3.6, o fluxo converte para o ponto fixo **(3)** e é caracterizado pela formação de trios de spin bariônicos (e, mais raramente, outros múltiplos de 3 spins). De fato, ambos os pontos fixos **(3)** e o ponto fixo SU(3) instável **(8)** têm a propriedade de que as frações de singletos e tripletos que são gerados são as mesmas. Como resultado (ver Ref. [21]), as propriedades físicas de baixas energias desta fase de singletos aleatórios bariônicos têm a mesma forma genérica da fase de singletos aleatórios mesônica, mas com  $q = q_B = 2\pi/3$  e a importante diferença de que os expoentes universais mudam para  $\psi = \psi_B = 1/3$  e  $\phi = \phi_B = 4/3$ .

Quando a distribuição inicial de ângulos tem um desvio padrão  $\sigma_\theta$ , o diagrama de fases continua válido conquanto que a distribuição de ângulos seja tal que seu domínio esteja no interior de uma única bacia de atração. As bacias de atração das fases antiferromagnéticas estão mostradas na Fig. 3.9. Quando este não é o caso, a complexidade do fluxo aumenta. Se as fases mesônicas e bariônicas competem, a fase mesônica absorve a fase bariônica. Quando a fase FM compete com qualquer outra, o sistema flui para uma “Large Spin Phase” [26]. Com essa análise, completamos a caracterização do diagrama de fases da Figura 3.5.

Conforme dissemos anteriormente, os resultados desta Seção também foram verificados numericamente. Passamos agora a tais resultados numéricos.

### 3.8 Resultados numéricos

Implementamos numericamente o procedimento de SDRG para complementar e verificar os resultados citados anteriormente. Nos focaremos primeiro em Hamiltonianos nos quais todas as ligações têm o mesmo ângulo inicial  $\theta_i = \theta_0$  com  $-\frac{3\pi}{4} < \theta_0 < \frac{\pi}{2}$ , enquanto  $J$  é distribuído uniformemente no intervalo  $0 \leq J \leq 1$ . Os resultados aqui obtidos correspondem a cadeias de comprimento  $L_0 \sim 10^6$  spins, e cuja média sobre a desordem foi tomada considerando 20 cadeias diferentes.

Na Figura 3.10 mostramos, para uma coleção de ângulos iniciais, o valor médio de  $\tan \theta$  conforme a distância efetiva entre spins  $L$  entre spins não-dizimados aumenta monotonicamente. Esta distância efetiva é dada por  $L = \frac{L_0}{N}$ , onde  $N$  é o número de spins não dizimados. Para  $-\frac{\pi}{2} < \theta_0 < \frac{\pi}{4}$  (três curvas azuis), o fluxo é na direção do ponto fixo **(1)**, com  $\theta = 0$ . Quando  $-\frac{3\pi}{4} < \theta_0 < -\frac{\pi}{2}$  (curva vermelha), o fluxo tende ao ponto fixo **(2)**, com  $\tan \theta = 2$ ,  $D < 0$ . As curvas verdes correspondem ao intervalo  $\frac{\pi}{4} < \theta_0 < \frac{\pi}{2}$ , no qual o sistema flui para o ponto fixo **(3)**, onde  $\tan \theta = 2$  e  $D \leq 0$ , sendo a probabilidade de  $D > 0$  igual a de  $D < 0$ . Para o caso  $\theta_0 = \frac{\pi}{4}$  (curva preta), graficamos o inverso da  $\langle \cot \theta \rangle$  no eixo vertical direito. Esse fluxo corresponde ao ponto fixo **(8)**, para o qual, assintoticamente, metade das ligações tem  $\theta = -\frac{\pi}{2}$  e metade tem  $\theta = \frac{\pi}{4}$ , de tal maneira que  $\langle \cot \theta \rangle \rightarrow \frac{1}{2}$ . Esses resultados numéricos confirmam os pontos fixos encontrados e delimitam suas bacias de atração.

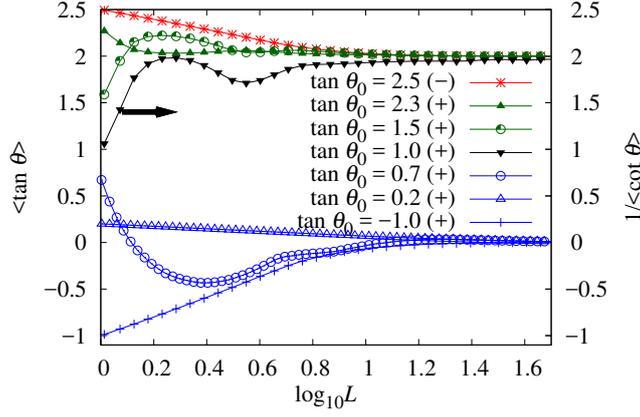


Figura 3.10: Fluxo do GR para valores fixos de ângulos iniciais  $\theta_0$ , aqui representados pela sua tangente e valor do sinal de  $J_i$ , entre parênteses. O valor médio  $\langle \tan \theta \rangle$ , como função da distância média  $L$  entre spins não dizimados, para valores diferentes do ângulo  $\theta_0$ . Para  $\tan \theta_0 = 1$ , graficamos  $\frac{1}{\langle \cot \theta \rangle}$  no eixo direito vertical.

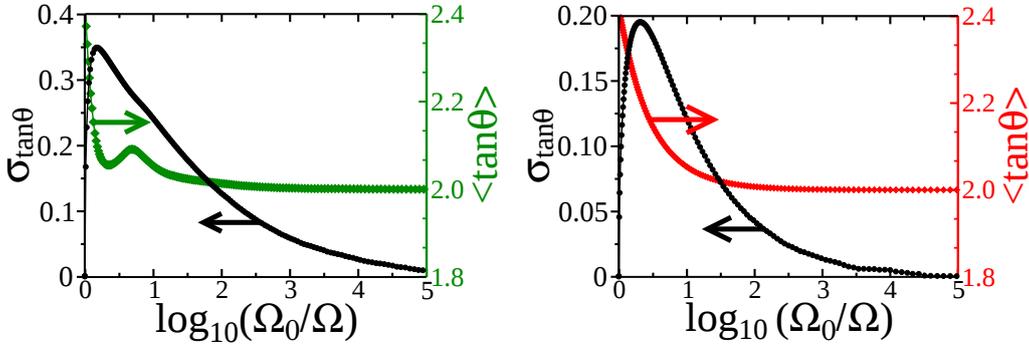


Figura 3.11: Média e desvio padrão da distribuição de  $\tan \theta_i$  durante o fluxo do grupo de renormalização, com as condições iniciais  $\theta_i = 3\pi/8$  e  $\theta_i = -5\pi/8$ , respectivamente, e  $\sigma_{\tan \theta} = 0$  em ambos os casos.

Nós também verificamos numericamente (Fig. 3.11) que a distribuição de ângulos inicialmente se alarga, mas que eventualmente tende a uma delta de Dirac conforme o fluxo tende aos pontos fixos estáveis. Isso é esperado já que os pontos fixos estáveis são caracterizados por um único valor de  $\tan \theta$ . Em outras palavras,  $\sigma_{\tan \theta}$  é uma variável irrelevante nos pontos fixos estáveis. Conforme discutiremos à frente, quando falarmos de desordem fraca, esperamos os resultados do regime de desordem forte deixem de ser válidos em um domo concentrado na fase de Haldane  $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ . Isso encerra o estudo completo do diagrama de fases da Fig 3.5 no plano  $\sigma_\theta = 0$ .

Na região  $-\frac{\pi}{2} < \theta_0 < \frac{\pi}{4}$ , o fluxo é caracterizado pelo desaparecimento de termos biquadráticos, porém uma diferença deve ser notada no transiente dos casos  $\arctan \frac{1}{3} < \theta_0 < \frac{\pi}{4}$  e  $-\frac{\pi}{2} < \theta_0 < \arctan \frac{1}{3}$ . Na região  $-\frac{\pi}{2} < \theta_0 < \arctan \frac{1}{3}$  todas as dizimações resultam em singletos (ver Eq. (3.7) e Fig. 3.10) e, portanto,  $\langle \tan \theta \rangle$  flui monotonicamente para zero (ver casos  $\tan \theta_0 = 0.2$  e  $-1$  da Fig. 3.10). Quando  $\arctan \frac{1}{3} < \theta_0 < \frac{\pi}{4}$ , por outro lado, ambos os tipos de regras listadas nas Eqs. (3.8) e (3.7) ocorrem, gerando ângulos negativos, de tal maneira que  $\langle \tan \theta \rangle$  pode mudar de sinal durante o fluxo, antes de, assintoticamente, atingir zero ( $\tan \theta_0 = 0.7$  da Fig. 3.10).

Para determinar numericamente o valor de  $\psi$  em cada fase de singletos aleatórios do diagrama de fases, nós acompanhamos o fluxo da escala de energia  $\Gamma \equiv \ln \frac{\Omega_0}{\Omega}$  (onde  $\Omega_0$  é o maior valor inicial de  $\Delta_i$ ; ver Capítulo 2 para mais detalhes) como função da distância média  $L$  dos conjuntos de spins não dizimados. Na Fig. 3.12(a), nós mostramos os resultados para vários ângulos  $\theta_0$ . Os dados foram ajustados de acordo com

$$\log_{10} L = a + \frac{1}{\psi} \log_{10} (1 + b\Gamma), \quad (3.38)$$

sendo  $a, b$  e  $\frac{1}{\psi}$  parâmetros de ajuste. Conforme pode ser visto na Fig. 3.12(a), o ajuste se mostra muito adequado aos dados numéricos. Para  $b\Gamma \gg 1$ , recuperamos a forma mais familiar do expoente de escalamento dinâmico  $L \sim \Gamma^{\frac{1}{\psi}}$  (ver Capítulo 2). Os valores de  $\psi$  que encontramos numericamente podem ser vistos na Fig. 3.12b

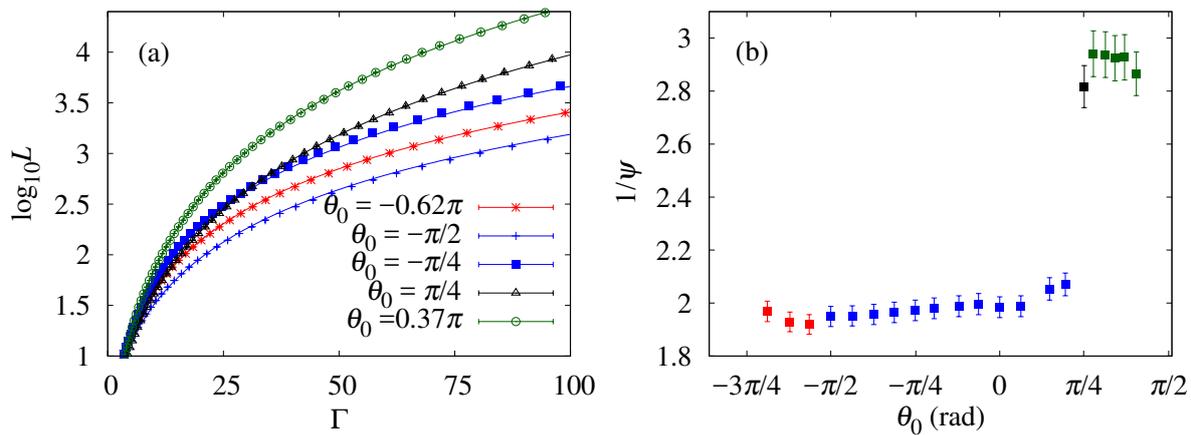


Figura 3.12: Resultados numéricos do fluxo do GR. (a) Determinação do expoente  $\psi$  de escalamento dinâmico que relaciona distância média  $L$  entre spins não dizimados como função de  $\Gamma = \ln \frac{\Omega}{\Omega_0}$ , onde  $\Omega$  é a escala de energia do GR. As linhas cheias são o ajuste dos pontos usando a Eq. (3.38); (b) inverso do expoente  $\psi$  como função do ângulo inicial  $\theta_0$ .

como função de  $\theta_0$ , onde pode-se ver a proximidade aos valores previstos para as fases de singletos aleatórios mesônica ( $\psi_M = \frac{1}{2}$ ) e bariônica ( $\psi_B = \frac{1}{3}$ ). É também evidente o salto na fronteira entre as fases em  $\theta_0 = \frac{\pi}{4}$ . As barras de erro são dominadas pela incerteza na região onde a Eq. 3.38 é válida.

### 3.9 Comportamento no regime de desordem baixa

Comentamos agora sobre o comportamento do sistema quando a desordem é baixa. A fase espontaneamente dimerizada ( $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{4}$ ) é instável por perturbações de desordem fraca devido à formação de paredes de domínio fracamente acopladas [56, 60]. Pode ser mostrado também que a desordem fraca é uma perturbação relevante no ponto  $\theta = \frac{\pi}{4}$  [61]. Em geral, esperamos que desordem seja perturbativamente relevante em toda a fase sem gap  $\frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ .

Desordem fraca infinitesimal é uma perturbação irrelevante na fase gapeada de Haldane  $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ . O comportamento em  $\theta_i = 0$  foi determinado em detalhes [56, 23, 57, 58, 59]. O aumento gradual da desordem leva ao fechamento do gap de Haldane, ao mesmo tempo que o parâmetro de ordem topológico se mantém com o mesmo valor [23]. Uma região de Griffiths [62] aparece (ver Fig. 3.13), com um escalamento convencional entre energia e comprimento dado por  $\Omega \sim L^{-z}$ . Nesta região, as correlações de spin têm curto alcance, a susceptibilidade se comporta como  $\chi \sim T^{1/z-1}$ , enquanto o calor específico apresenta comportamento  $c \sim T^{1/z}$ . O expoente dinâmico  $z$  diverge no ponto crítico [23, 57, 58, 59, 63, 62]. Para valores de desordem acima desse valor, o sistema entra em uma fase de singletos aleatórios (novamente, ver Fig. 3.13) governada por um ponto crítico de desordem infinita com  $\psi = \frac{1}{2}$ . O comportamento genérico é esperado se manter em toda a região  $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ , com exceção do ponto AKLT.

Desde que o ângulo local  $\theta_i$  seja o mesmo em todos os sítios e igual a  $\arctan \frac{1}{3}$ , o estado fundamental será independente da desordem [64]. Note que isso se reflete no procedimento do GR, uma vez que o gap de um par de spins se fecha quando  $\Delta_i = 3J_i |\tan \theta_i - \frac{1}{3}|$  (ver Fig. 3.3), o que faz o passo de dizimação que derivamos ser mal definido nas vizinhanças do ponto AKLT. O gap de Haldane, contudo, se anulará no limite de desordem forte quando a distribuição de constantes de acoplamento não tem um limitante inferior.

O procedimento de GR que usamos neste Capítulo é apropriado somente no limite de desordem forte. É interessante notar que o procedimento falha no regime de desordem baixa, quando esta é irrelevante [56, 23, 57, 58, 59, 62, 65]. Esta falha é assinalada pelo fato de que a distribuição de acoplamentos não alarga conforme a escala de energia é reduzida. Nós somente detectamos tal falha do método dentro do gomo na fase topológica  $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ . Para este caso, uma generalização do método da referência [57] é necessário. Nossos resultados numéricos indicam que a desordem fraca pode ser relevante mesmo próximo aos extremos da fase de Haldane  $\pm \frac{\pi}{4}$ . Já que se espera que as fases dimerizadas ( $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{4}$ ) e sem gap ( $\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{2}$ ) sejam desestabilizadas por qualquer quantidade de desordem, conjecturamos que não há transição de fase em desordem intermediária. Colecionando tais resultados, chegamos ao diagrama de fases retratado na Fig. 3.5.

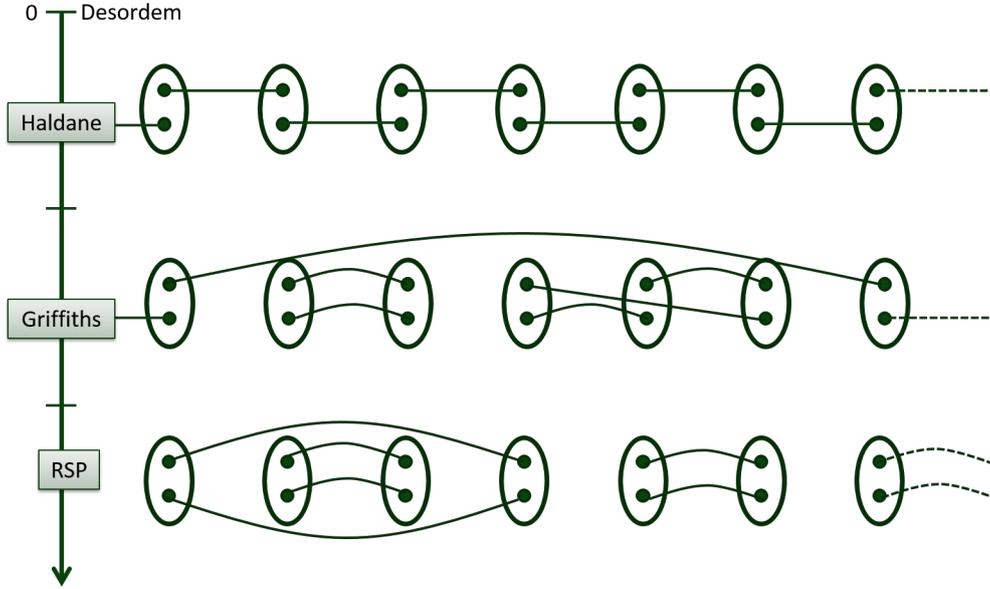


Figura 3.13: Diagrama de fases da cadeia de spin 1 no ponto  $\theta = 0$ , conforme a desordem (caracterizada, por exemplo, pelo desvio padrão da distribuição de  $J$ ) aumenta. Cada spin 1 representado por dois spins  $\frac{1}{2}$  simetrizados. O comportamento aqui esquematizado se generaliza para a região de ângulos finitos no intervalo  $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ . Para desordem baixa, o gap de Haldane protege a fase do sistema sem desordem (ver Fig. 3.2). Para desordem intermediária, há uma fase de Griffiths, onde clusters de mais de dois spins 1 formam um singleton. Por fim, para desordem alta (RSP), os singletons são majoritariamente formados por pares de spins.

### 3.10 Simetria emergente SU(3)

Alguns elementos do fluxo para uma fase de desordem infinita determinam as propriedades físicas do sistema a temperatura nula ou baixas temperaturas. No caso que estamos analisando, os elementos necessários são:

(a) Estado fundamental composto por uma coleção de spins que formem singletons fortemente acoplados, formados por pares de spins, nos pontos fixos (1), (2) e (7), e majoritariamente por trios de spins nos pontos fixos (3) e (8) [2, 16, 21]

(b) Excitações de baixas energias consistindo essencialmente de aglomerados de spin 1 com densidade bem conhecida [2, 15, 21]

Vamos mostrar agora que estes dois elementos, suficientes para a caracterização da fase, apresentam propriedades características de sistemas com simetria SU(3), o que permitirá concluirmos que, em uma região estendida do diagrama de fases, o sistema apresenta uma simetria SU(3) emergente. De fato, os singletons formados em (a) não são somente singletons de SU(2), mas sim singletons de SU(3). Além disso, aglomerados de spin 1 de (b) se transformam como quarks ou antiquarks de SU(3). Isso pode ser mais facilmente visto do fato que os multipletos fundamentais de dizimações que geram tanto singletons quanto triplets (equações (3.7) e (3.8)) são independentes do ângulo  $\theta$ . Em outras palavras, o estado fundamental dos pontos fixos (1), (2) e (7) são os mesmos, e então os estados fundamentais de (3) e (8) também são os mesmos. Isso leva imediatamente ao resultado de que, em  $T = 0$ , as funções de correlação média e típica de todos os operadores SU(3)  $\Lambda_a$  ( $a = 1, \dots, 8$ ), o que inclui operadores de spins dipolares e quadrupolares, são governados pelos mesmos expoentes ( $\psi_H, \phi_H$ ) sendo  $H = M$  ou  $B$ .

Analogamente, as susceptibilidades SU(3) das fases de singletons aleatórios podem ser escritas como [15, 21]

$$\chi_a(T) = \langle \Lambda_a^2 \rangle / T \sim n(\Omega = T) \chi_a^0(T), \quad (3.39)$$

onde  $n(\Omega) = \frac{N(\Omega)}{L_0}$  é a densidade de aglomerados de spins não dizimados na escala  $\Omega$  e  $\chi_a^0(T)$  é a susceptibilidade SU(3) de um aglomerado de spins livres. Já que aglomerados de spins livres são quarks ou antiquarks SU(3),  $\chi_a^0(T)$  é invariante por transformações SU(3) e independente de  $a$ . Tomando, por exemplo,  $\Lambda_3 = \tilde{\Lambda}_3 = S_z$ , concluímos que  $\chi_a^0(T) = 2/(3T)$  para as duas representações. Já que  $n(\Omega = T) \sim 1/|\ln T|^{1/\psi_H}$ , encontramos finalmente que  $\chi_a \sim 1/(T|\ln T|^{1/\psi_H})$ .

A simetria emergente ocorre mesmo no ponto de Heisenberg (1), uma propriedade que nunca anteriormente tinha sido percebida. Ressaltamos que mesmo que as várias quantidades sejam governadas pelos mesmos expoentes, os pre-fatores não são os mesmos devido à inexatidão do procedimento do SDRG no início do fluxo. Um fenômeno similar é observado em cadeias de spin  $\frac{1}{2}$  do tipo XXZ (isto é, mesmos acoplamentos nas direções

$x$  e  $y$ , mas diferente na direção  $z$ ). Neste caso, as correlações longitudinais e transversas são governadas pelos mesmos expoentes, apesar da quebra da simetria  $SU(2)$ . [2]

### 3.11 Conclusões

Neste Capítulo, delimitamos a rota genérica que leva ao aparecimento de simetrias emergentes em sistemas desordenados de spin: os multipletos fundamentais do problema de dois spins devem se transformar como representações irredutíveis da simetria emergente. No caso que aqui discutimos, o singleto e o tripleto de dois spins 1 são invariantes por transformações do grupo  $SU(3)$ . A simplicidade do mecanismo responsável pela simetria emergente que aqui foi descoberto sugere outros casos onde o mesmo pode acontecer. Surpreendentemente, como mostraremos no Capítulo 5, cadeias de spin  $S$  invariantes por transformações  $SU(2)$  com  $S > 1$  apresentam fases de singletos aleatórios mesônicas com invariância  $SU(2S+1)$ , mas sem fase de simetria  $SU(3)$  do tipo bariônica.

## Capítulo 4

# Tensores esféricos irredutíveis e Hamiltonianos de spin

Neste Capítulo, introduziremos os Tensores Esféricos Irredutíveis (TEIs) e mostraremos como utilizá-los em situações de relevância física. Este Capítulo introduz as ferramentas necessárias para o estudo de cadeias de spin invariantes por rotações  $SU(2)$  e reversão temporal, que será feito no Capítulo seguinte. Além disso, mostramos como escrever Hamiltonianos invariantes por  $SU(N)$  usando TEIs.

Começamos recapitulando alguns exemplos bastante simples de tensores. Os exemplos mais familiares são tensores de ordem um, ou vetores, como os vetores posição  $\mathbf{R}$  e momento linear  $\mathbf{P}$ . Também familiar é o produto escalar de dois vetores, invariante por rotações, que forma um tensor de ordem zero. Outros exemplos familiares de tensores são os momentos multipolares de uma distribuição de partículas, como os momentos de quadrupolo nucleares (tensores de segunda ordem), formados a partir de componentes do vetor de posição  $\mathbf{R}$ . Para nossos propósitos, usaremos tensores construídos a partir de operadores de spin  $\mathbf{S}_i$ , definidos no sítio  $i$ . Para tanto, é necessária a introdução formal de tais objetos, partindo de suas relações de comutação definidoras. É o que faremos na sequência.

### 4.1 Tensores esféricos irredutíveis: definição

Os TEIs construídos em termos de operadores de spin  $\mathbf{S}_i$  podem ser definidos através das relações de comutação que estes satisfazem com operadores de spin usuais [54]

$$[S_i^\pm, Y_{J,M}(\mathbf{S}_i)] = \sqrt{J(J+1) \mp M(1 \pm M)} Y_{J,M \pm 1}(\mathbf{S}_i), \quad (4.1)$$

$$[S_i^z, Y_{J,M}(\mathbf{S}_i)] = M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i). \quad (4.2)$$

Aqui,  $Y_{J,M}(\mathbf{S}_i)$  é um TEI de ordem  $J$ , com  $2J+1$  componentes rotuladas por  $M$ , sendo  $M = -J, -J+1, \dots, J-1, J$ . O fato de serem irredutíveis diz respeito às suas propriedades sob transformações ortogonais, que não misturam TEIs de ordens diferentes.

Uma vez conhecidas as relações de comutação que esses objetos satisfazem, torna-se simples contruí-los. A ideia é começar com o TEI de máximo  $M$ ,  $Y_{J,M=J}(\mathbf{S}_i)$ , que é dado por

$$Y_{J,M=J}(\mathbf{S}_i) \propto (S_i^+)^J, \quad (4.3)$$

e usar recursivamente a relação de comutação (4.1), que permite diminuir a componente  $M$

$$Y_{J,M-1}(\mathbf{S}_i) = \frac{[S_i^-, Y_{J,M}(\mathbf{S}_i)]}{\sqrt{J(J+1) - M(M-1)}}. \quad (4.4)$$

Note que esses TEIs nutrem certas semelhanças com os harmônicos esféricos  $\mathcal{Y}_{J,M}(\mathbf{r})$ . Uma diferença fundamental, contudo, deve ser levada em conta: se os  $\mathcal{Y}_{J,M}(\mathbf{r})$  forem promovidos a TEIs, um processo de simetrização é necessário. Por exemplo, tomemos  $\mathcal{Y}_{2,1} \propto \frac{xz}{r^2}$ . O TEI de spin equivalente será  $Y_{2,1}(\mathbf{S}_i) \propto \frac{1}{2}(S^z S^x + S^x S^z)$ . Esse processo de simetrização não é necessário para a promoção de harmônicos esféricos de ordens zero e um a TEIs, já que estes são lineares nas componentes de spin. A origem da necessidade de simetrização está na não comutação de componentes diferentes de operadores de spin. Tal procedimento não seria necessário na formação de TEIs que fossem função da posição  $Y_{J,M}(\mathbf{R}_j)$ , já que os operadores  $X$ ,  $Y$  e  $Z$  comutam. As relações de comutação de spin são automaticamente levadas em conta pela aplicação recursiva da Eq. (4.4) e, portanto, os

TEIs originados com esta receita são naturalmente simetrizados. A única liberdade restante é a normalização dos TEIs  $Y_{J,M=J}(\mathbf{S}_i)$ . Usaremos a mesma normalização da Ref. [54]

Um exemplo simples que evidencia a utilidade de usar TEIs é encontrada no produto de operadores de spins. Consideremos o caso das 9 componentes cartesianas da diádica  $S_i^j S_i^k$  ( $j, k = x, y, z$ ). Em termos de TEIs, a diádica pode ser reescrita como

$$S_i^j S_i^k = Y_0(\mathbf{S}_i) + Y_1(\mathbf{S}_i) + Y_2(\mathbf{S}_i), \quad (4.5)$$

sendo

$$Y_0(\mathbf{S}_i) = \frac{2}{3} \mathbf{S}_i^2 \delta^{j,k}, \quad (4.6)$$

$$Y_1(\mathbf{S}_i) = \frac{1}{2} (S_i^j S_i^k - S_i^k S_i^j), \quad (4.7)$$

$$Y_2(\mathbf{S}_i) = \frac{1}{2} \left( S_i^j S_i^k + S_i^k S_i^j - \frac{2}{3} \mathbf{S}_i^2 \delta^{j,k} \right). \quad (4.8)$$

Note que não especificamos a componente  $M$  dos tensores resultantes da decomposição. Esta dependerá de quais componentes do operador de spin  $j, k$  forem escolhidas. O importante é que  $Y_0(\mathbf{S}_i)$ ,  $Y_1(\mathbf{S}_i)$  e  $Y_2(\mathbf{S}_i)$  não se misturam sob rotação. É este fato fundamental, com consequências dramáticas no fluxo do SDRG, que motiva trabalharmos com TEIs.

## 4.2 Hamiltoniano de spin em termos de Tensores Esféricos Irredutíveis

No Capítulo 5, estudaremos o diagrama de fases de cadeias de spins  $S$  invariantes por rotações. O Hamiltoniano de  $N_{\text{sites}}$  e spin  $S$  mais geral que é invariante por transformações  $SU(2)$  e reversão temporal é dado por

$$H = \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} \sum_{J=0}^{J_{\text{max}}} \alpha_i^{(J)} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^J, \quad (4.9)$$

onde  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  são operadores de spin  $S$  usuais no sítio  $i$  e  $\alpha_i^{(J)}$  são constantes de acoplamento que, por hora, podem assumir quaisquer valores. A potência máxima  $J_{\text{max}}$  é igual a  $2S$ , uma vez que potências mais altas que  $2S$  podem ter decompostas em termos de potências menores. Por exemplo, para  $S = 1$ , temos que a potência cúbica do produto escalar pode ser decomposta em potências menores de acordo com

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^3 = (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) - 2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 + 2. \quad (4.10)$$

Um passo importante é reescrever o Hamiltoniano (4.9) em termos dos TEIs. Para tal, definimos o operador  $\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$  como sendo o produto escalar de operadores de mesma ordem [54]

$$\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) \equiv \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}). \quad (4.11)$$

Usando as Eqs (4.1) e (4.2), pode-se verificar que

$$\left[ S_i^\pm + S_{i+1}^\pm, \hat{O}_J \right] = \left[ S_i^z + S_{i+1}^z, \hat{O}_J \right] = 0, \quad (4.12)$$

o que mostra que  $\hat{O}_J$  é invariante por rotação. Alternativamente, no Apêndice D, mostramos de outra maneira, usando o Teorema de Wigner-Eckart (ver Eq. (4.30)), que tais objetos são de fato invariantes por rotação.

Usando TEIs, o Hamiltoniano da Eq. (4.9) pode ser reescrito como

$$H = \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} \sum_{J=0}^{J_{\text{max}}} K_i^{(J)} \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}). \quad (4.13)$$

onde os acoplamentos  $K_i^{(J)}$  são combinações lineares dos  $\alpha_i^{(J)}$  e vice-versa.

Para nosso estudo, serão importantes TEIs de até quarta ordem. Estes são dados explicitamente em termos de operadores de spin por

$$\hat{O}_1 = \frac{3}{4\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2), \quad (4.14)$$

$$\hat{O}_2 = \frac{15}{16\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + \frac{15}{8\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 - \frac{5}{8\pi} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2, \quad (4.15)$$

$$\hat{O}_3 = \frac{7}{8\pi} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 3\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 + 3) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + \frac{35}{4\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 + \frac{35}{8\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^3 - \frac{35}{16\pi} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2, \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} \hat{O}_4 &= -\frac{45}{32\pi} (17\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - 6(\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2) - 9) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) - \frac{45}{32\pi} (6\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - 5(\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2) - 39) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 \\ &+ \frac{1575}{32\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^3 + \frac{315}{32\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^4 - \frac{729}{64\pi} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - \frac{27}{16\pi} (\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^4 + \mathbf{S}_1^4 \mathbf{S}_2^2) + \frac{27}{32\pi} \mathbf{S}_1^4 \mathbf{S}_2^4. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Invertendo as equações acima, podemos encontrar o produto  $(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^J$  em termos dos TEIs

$$(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) = \frac{4\pi}{3} \hat{O}_1, \quad (4.18)$$

$$(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 = -\frac{2\pi}{3} \hat{O}_1 + \frac{8\pi}{15} \hat{O}_2 + \frac{1}{3} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2, \quad (4.19)$$

$$(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^3 = \left( -\frac{8\pi}{30} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 3\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2) + \frac{8\pi}{15} \right) \hat{O}_1 - \frac{16\pi}{15} \hat{O}_2 + \frac{8\pi}{35} \hat{O}_3 - \frac{1}{6} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2, \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^4 &= \frac{2\pi}{3} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 2\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - 1) \hat{O}_1 + \frac{8\pi}{105} (31 - 5\mathbf{S}_1^2 - 5\mathbf{S}_2^2 + 6\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2) \hat{O}_2 - \frac{8\pi}{7} \hat{O}_3 + \frac{32\pi}{315} \hat{O}_4 \\ &+ \frac{2}{15} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - \frac{1}{15} (\mathbf{S}_1^4 \mathbf{S}_2^2 + \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^4) + \frac{1}{5} \mathbf{S}_1^4 \mathbf{S}_2^4. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Usamos o mapeamento de operadores acima, segue que a transformação dos acoplamentos  $\alpha^{(J)}$  para  $K^{(J)}$  é

$$\alpha^{(1)} = \frac{1}{16\pi} \left( 12K^{(1)} + 15K^{(2)} + 14(3 + \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 3\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2) K^{(3)} \right) + \left( \frac{405}{32\pi} + \frac{135}{16\pi} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2) - \frac{765}{32\pi} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 \right) K^{(4)}, \quad (4.22)$$

$$\alpha^{(2)} = \frac{5}{8\pi} \left( 3K^{(2)} + 14K^{(3)} \right) + \left( \frac{1755}{32\pi} + \frac{225}{32\pi} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2) - \frac{135}{16\pi} \mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 \right) K^{(4)}, \quad (4.23)$$

$$\alpha^{(3)} = \frac{35}{8\pi} K^{(3)} + \frac{1575}{32\pi} K^{(4)}, \quad (4.24)$$

$$\alpha^{(4)} = \frac{315}{32\pi} K^{(4)}, \quad (4.25)$$

e, equivalentemente,

$$K^{(1)} = \frac{4\pi}{3} \alpha^{(1)} - \frac{2\pi}{3} \alpha^{(2)} - \frac{8\pi}{30} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 3\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - 2) \alpha^{(3)} + \frac{2\pi}{3} (\mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 - 2\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2 - 1) \alpha^{(4)}, \quad (4.26)$$

$$K^{(2)} = \frac{8\pi}{15} \alpha^{(2)} - \frac{16\pi}{15} \alpha^{(3)} + \frac{8\pi}{105} (31 - 5\mathbf{S}_1^2 - 5\mathbf{S}_2^2 + 6\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2) \alpha^{(4)}, \quad (4.27)$$

$$K^{(3)} = \frac{8\pi}{35} \alpha^{(3)} - \frac{8\pi}{7} \alpha^{(4)}, \quad (4.28)$$

$$K^{(4)} = \frac{32\pi}{315} \alpha^{(4)}. \quad (4.29)$$

### 4.3 Elementos de matriz de TEIs

Vamos agora mostrar como elementos de matriz de TEIs podem ser calculados. Para isso, consideremos um problema de dois spins, que chamaremos de  $\mathbf{S}_2$  e  $\mathbf{S}_3$ . Pelo Teorema de Wigner-Eckart (TWE), o elemento de matriz de um TEI de ordem  $J$  e componente  $M$ ,  $Y_{JM}(\mathbf{S}_i)$ ,  $i = 2, 3$ , é

$$\langle S_2 S_3, J' M' | Y_{JM}(\mathbf{S}_i) | S_2 S_3, J'' M'' \rangle = (-1)^{J-J'+J''} \frac{\langle J J''; M M'' | J J''; J' M' \rangle}{\sqrt{2J'+1}} \langle S_2 S_3, J' || Y_J(\mathbf{S}_i) || S_2 S_3, J'' \rangle, \quad (4.30)$$

onde  $\langle J' || Y_k(\mathbf{S}) || J \rangle$  é o chamado elemento de matriz reduzido, independente da componente  $M$  do operador tensorial e das projeções de momento angular  $M'$  e  $M''$ . Quando necessário, detalhes sobre o cálculo de elementos de matriz reduzidos serão explicitamente trabalhados, e os resultados colecionados no Apêndice E.

## 4.4 Geradores de $SU(N)$ em termos de TEIs

Nesta seção, explicamos como obter os  $N^2 - 1$  geradores de  $SU(N = 2S + 1)$  pela combinação de TEIs. O grupo  $SU(N)$  é introduzido no Apêndice B. A condição para o traço do produto de geradores do grupo pode ser escolhida como

$$\text{Tr}(\Lambda_i \Lambda_j) \propto \delta_{i,j}. \quad (4.31)$$

Para fazer a conexão com TEIs, comecemos notando que o número de tensores linearmente independentes para determinada ordem, digamos, igual a  $J$ , é igual a  $2J + 1$ . Colecionando todos eles, até ordem  $J_{\max} = 2S$ , exceto o tensor de traço não nulo de  $J = 0$ , vemos que o número de tensores linearmente independentes dessa coleção é

$$\sum_{J=1}^{2S} (2J + 1) = 2S(2S + 1) + 2S \quad (4.32)$$

$$= 4S(S + 1), \quad (4.33)$$

que é exatamente  $N^2 - 1$ , sendo  $N = 2S + 1$ . A escolha hermitiana apropriada de geradores do  $SU(N)$ , que rotularemos por  $\Lambda_{J,M}$ , pode ser encontrada pela combinação de TEIs de mesma ordem, com componentes  $M$  e  $-M$

$$\Lambda_{J,M} \propto \begin{cases} Y_{J,M}(\mathbf{S}) + Y_{J,-M}(\mathbf{S}), & M > 0, \\ Y_{J,0}(\mathbf{S}), & M = 0, \\ Y_{J,M}(\mathbf{S}) - Y_{J,-M}(\mathbf{S}), & M < 0. \end{cases} \quad (4.34)$$

Quando a combinação for feita com o sinal negativo, a constante global deve ser um número imaginário, para garantir a hermiticidade do operador.

Como as  $N^2 - 1$  matrizes são claramente linearmente independentes, hermitianas e sem traço, elas podem ser usadas para gerar o grupo  $SU(N)$ .

Para finalizar, podemos mostrar como a condição de normalização, Eq. (4.31), também pode ser garantida. Para isso, comecemos expandindo o produto de dois TEIs como uma combinação linear de TEIs [54]

$$Y_{J,M}(\mathbf{S}) Y_{J',M'}(\mathbf{S}) = \sum_{J'',M''} \zeta(J, J', J'') \times \langle JJ'; JM | JJ'; MM' \rangle Y_{J'',M''}(\mathbf{S}), \quad (4.35)$$

onde os fatores  $\zeta(J, J', J'')$  não dependem de componentes de tensores, e a soma sobre  $J''$  vai de  $|J - J'|$  até  $J + J'$ .

O traço envolve o cálculo de elementos de matriz diagonais da equação acima, isto é

$$\langle SM | Y_{J,M}(\mathbf{S}) Y_{J',M'}(\mathbf{S}) | SM \rangle = \sum_{J'',M''} \langle JJ'; J''M'' | JJ'; MM' \rangle \times \langle SM | Y_{J'',M''}(\mathbf{S}) | SM \rangle. \quad (4.36)$$

O TWE, Eq. (4.30), garante que o lado direito da equação é não-nulo somente se  $M'' = 0$  ou, equivalentemente, se  $M' = -M$ . A condição de traço se torna

$$\text{Tr}(Y_{J,M}(\mathbf{S}) Y_{J',-M}(\mathbf{S})) = \sum_{J''=|J-J'|}^{J+J'} \langle JJ'; J''0 | JJ'; M - M \rangle \times \text{Tr}(Y_{J'',0}(\mathbf{S})). \quad (4.37)$$

Contudo, somente  $Y_{0,0}(\mathbf{S})$  tem um traço não-nulo. Portanto, o único termo que participa do somatório é  $J'' = 0$ . A condição  $J'' = 0$  exige  $J = J'$ . Encontramos, portanto, que somente  $Y_{J,M}(\mathbf{S}) Y_{J,-M}(\mathbf{S})$  tem um traço não-nulo. Calculando explicitamente o produto  $\Lambda_{J,M} \Lambda_{J',M'}$  em termos dos operadores  $Y_{J,M}(\mathbf{S})$  e assumindo, por exemplo  $M, M' > 0$ , chegamos a

$$\text{Tr}(\Lambda_{J,M} \Lambda_{J',M'}) \propto 2\delta_{J,J'} (\delta_{M,M'} + \delta_{M,-M'}). \quad (4.38)$$

A condição de traço, Eq. (4.31), é, portanto, satisfeita pelos geradores construídos à partir de TEIs.

Uma vez munidos dos geradores de  $SU(N)$  em termos de TEIs, partimos para a tarefa de escrever Hamiltonianos invariantes por transformações do grupo  $SU(N)$  em termos de TEIs.

$N$	$S$	$\alpha$
3	1	$\alpha = \left(\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}\right)$
4	$\frac{3}{2}$	$\alpha = \left(\frac{33}{64}, \frac{31}{48}, -\frac{5}{36}, -\frac{1}{9}\right)$
5	2	$\alpha = \left(0, \frac{5}{6}, \frac{17}{72}, -\frac{1}{18}, -\frac{1}{72}\right)$

Tabela 4.1: Hamiltonianos de spin  $S$  simétricos por transformações de  $SU(N)$  (ver Eq. (4.9)), com a representação fundamental do grupo  $SU(N)$  em um dos sítios e a representação anti-fundamental no outro sítio.

## 4.5 Hamiltonianos de Tensores Esféricos Irredutíveis invariantes por transformações $SU(N)$

Nesta Seção, vamos procurar por ajustes nos acoplamentos do Hamiltoniano Eq. (4.9) que o tornem invariantes por transformações do grupo  $SU(N)$ . A ideia básica é comparar o espectro do Hamiltoniano com simetria  $SU(N)$  e o espectro proveniente da Eq. (4.9). Pelo ajuste dos parâmetros  $K^{(J)}$ , podemos fazer os espectros coincidirem, o que é condição necessária para a simetria dos Hamiltonianos ser a mesma. Como na Seção anterior mostramos a correspondência entre TEIs e geradores de  $SU(N)$ , essa condição se mostrará também suficiente. Usaremos de base a Ref. [21], onde os autovalores de Hamiltonianos  $SU(N)$  foram determinados. O passo inicial é analisar o problema de dois spins, chamados  $S_2$  e  $S_3$ , que podem corresponder à representação fundamental de  $SU(N)$  no sítio 2 e anti-fundamental no sítio 3 ou realizações da representação fundamental do grupo  $SU(N)$  em ambos os sítios. É evidente, da Seção anterior, que  $N$  deve ser igual a  $2S + 1$ , sendo  $S = S_2 = S_3$ . O Hamiltoniano de  $N_{\text{sites}}$  spins pode ser construído pela soma sobre sítios do Hamiltoniano de 2 sítios.

### 4.5.1 Representações fundamental e antifundamental de $SU(N)$ em sítios alternados

Neste caso, o estado de mais baixa energia é um singleto, cuja energia nós chamaremos de  $E_0$  e cujo autovetor é  $|J = 0\rangle$ . Todos os outros multipletos de  $SU(N)$  terão a mesma energia  $E_{J>0}$  com autovetores  $|J > 0\rangle$ . A dimensão do espaço gerado pelos vetores  $|J > 0\rangle$  é obviamente  $(2S + 1)^2 - 1 = 4S(S + 1)$ . Reescrevendo o Hamiltoniano na base de autovetores, temos

$$H_{SU(N)a} = E_0 P_0 + E_1 (1 - P_0), \quad (4.39)$$

onde o projetor foi definido na Eq. (5.2). Deslocando a energia por uma constante  $-E_1$ , encontramos

$$H_{SU(N)a} = (E_0 - E_1) P_0 = -R P_0$$

sendo  $-R = E_0 - E_1 < 0$  um pré-fator global. Vamos agora a alguns exemplos explícitos onde podemos usar a equação acima. Representando os acoplamentos do Hamiltoniano (4.9) por um vetor  $\alpha = (\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(2S+1)})$ , alguns exemplos de Hamiltonianos de spin  $S$  simétricos por transformações de  $SU(N)$  são listados na Tabela 4.1.

Para reescrever o Hamiltoniano em termos de TEIs, precisamos de alguns resultados adicionais. São esses resultados que mostraremos na sequência.

#### 4.5.1.1 Em termos de TEIs

Vamos agora reescrever o Hamiltoniano invariante por transformações  $SU(N)$  em termos de TEIs. Começamos assumindo que o projetor  $P_0$  possa ser escrito como

$$-P_0 = \sum_J \phi_J(S) \hat{O}_J(\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3), \quad (4.40)$$

onde  $S_2 = S_3 = S$  e os coeficientes dados por  $\phi_J(S)$ . Justificaremos a equação acima encontrando explicitamente  $\phi_J(S)$ . Para o cálculo de elementos de matriz da equação acima, usamos a Ref. [54], onde mostra-se que elementos de matriz de  $\hat{O}_J$  são dados por

$$\langle J'M' | \hat{O}_J | J''M'' \rangle = (-1)^{2S+J''} \delta_{J',J''} \delta_{M',M''} \left\{ \begin{matrix} J'' & S & S \\ J & S & S \end{matrix} \right\} |\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2. \quad (4.41)$$

onde  $\{\dots\}$  representa o símbolo  $\delta$ - $j$  de Wigner. O fato de que  $J = J''$  e  $M' = M''$  decorrem trivialmente do fato de que  $\hat{O}_J$  é um operador escalar (ver Apêndice D para a demonstração). O elemento de matriz reduzido de  $Y_J(\mathbf{S})$ ,  $\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle$ , é calculado no Apêndice E. Usando que  $\langle \tilde{S}, \tilde{M} | P_0 | \tilde{S}, \tilde{M} \rangle = \delta_{\tilde{S},0}$ , o cálculo de elementos de matriz da Eq. (4.40) no estado  $|\tilde{S}, \tilde{M}\rangle = |S_2 S_3; \tilde{S}, \tilde{M}\rangle$ , encontrado pela soma dos momentos angulares  $S_2$  e  $S_3$  fornece

$$(-1)^{2S+\tilde{S}+1} \delta_{\tilde{S},0} = \sum_J \phi_J \left\{ \begin{array}{ccc} \tilde{S} & S & S \\ J & S & S \end{array} \right\} |\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2. \quad (4.42)$$

Usando a relação de ortogonalidade, também obtida da Ref. [54],

$$\sum_{\tilde{S}} (2\tilde{S}+1) \left\{ \begin{array}{ccc} \tilde{S} & S & S \\ J & S & S \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} J'' & S & S \\ \tilde{S} & S & S \end{array} \right\} = \frac{\delta_{J,J''}}{(2J''+1)}, \quad (4.43)$$

multiplicamos a Eq. (4.42) por  $(2\tilde{S}+1) \left\{ \begin{array}{ccc} J'' & S & S \\ \tilde{S} & S & S \end{array} \right\}$  e somamos em  $\tilde{S}$  para encontrar

$$\sum_{\tilde{S}} (-1)^{2S+\tilde{S}+1} \delta_{\tilde{S},0} \left\{ \begin{array}{ccc} \tilde{S} & S & S \\ J'' & S & S \end{array} \right\} = \frac{|\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2}{(2J''+1)} \phi_{J''}. \quad (4.44)$$

Usando a delta de Kronecker do lado esquerdo e o símbolo  $\delta$ - $j$  quando  $\tilde{S} = 0$  [54]

$$\left\{ \begin{array}{ccc} 0 & S & S \\ J'' & S & S \end{array} \right\} = \frac{(-1)^{J''+2S}}{2S+1} \quad (4.45)$$

e voltando à variável  $J$ , encontramos, finalmente, os coeficientes  $\phi_J(S)$

$$\phi_J(S) = \frac{(-1)^{J+1}}{|\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2} \frac{(2J+1)}{(2S+1)}. \quad (4.46)$$

O elemento de matriz reduzido do denominador da equação acima é discutido no Apêndice E. A característica mais relevante da Eq. (4.46) é que o sinal de  $\phi_J(S)$  se alterna com  $J$ , o que garante que os acoplamentos do Hamiltoniano com simetria  $SU(N)$  estão na região do espaço de parâmetros onde o produto  $(-1)^{J+1} K^{(J)}$  é sempre positivo. Esse fato será importante na determinação da simetria dos pontos fixos do próximo Capítulo.

## 4.5.2 Representação fundamental de $SU(N)$ em todos os sítios

Podemos encontrar também o Hamiltoniano de spins para o caso onde os operadores de spin são geradores da representação fundamental de  $SU(N)$  em cada sítio. O espectro consiste de dois níveis de energia, separados por um gap que é independente de  $N$  [21]. A degenerescência do estado fundamental é [21]  $\frac{N(N-1)}{2} = S(2S+1)$ , enquanto a degenerescência dos estados excitados é  $\frac{N(N+1)}{2} = (2S+1)(S+1)$ .

Para ganhar intuição sobre qual é o Hamiltoniano que tem o mesmo espectro do problema  $SU(N)$ , começamos com valores pequenos de  $N$ . Para  $N = 2$  ( $S = \frac{1}{2}$ ), as degenerescências são 1, para o estado fundamental, e 3, para os estados excitados. Obviamente, tal espectro pode ser encontrado tomando o singleto de  $SU(2)$   $J = 0$  como estado fundamental, e  $J = 1$  para o tripleto excitado. Para  $N = 3$  ( $S = 1$ ), as degenerescências são 3, para o estado fundamental, e 6 para os estados excitados (conforme já havíamos encontrado no Capítulo 3).

A generalização para maiores valores de  $N$  é a seguinte. Os multipletos de momento angular pares e ímpares são separados em dois conjuntos. O estado fundamental, com energia  $E_0$ , é formado por uma coleção de multipletos pares se o spin é semi-inteiro (generalizando o caso  $N = 2$ ,  $J = 0$ ), enquanto, se o spin é inteiro, consiste de uma coleção de multipletos ímpares (generalizando o caso  $N = 3$ ,  $J = 1$ ). Todos os multipletos restantes têm a mesma energia  $E_1$ , e formam o estado excitado.

Por um cálculo explícito, vejamos que a generalização que fizemos acima realmente fornece os resultados corretos para as degenerescências. Chamemos de  $N_f$  a degenerescência do estado fundamental. Para spins  $S$  semi-inteiros, a degenerescência do estado fundamental é encontrada pela soma dos multipletos pares. Portanto,

$$N_f = \sum_{J=0}^{S-\frac{1}{2}} \deg(2J), \quad (4.47)$$

onde  $\deg(J) = 2J+1$  é a degenerescência do multipletto de  $J$ . Então,

$N$	$S$	$\alpha$
3	1	$\alpha = (-1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
4	$\frac{3}{2}$	$\alpha = (-\frac{99}{64}, -\frac{9}{16}, \frac{11}{36}, \frac{1}{9})$
5	2	$\alpha = (-1, -\frac{5}{4}, -\frac{13}{72}, \frac{1}{12}, \frac{1}{72})$

Tabela 4.2: Hamiltonianos de spin  $S$  simétricos por transformações de  $SU(N)$  (ver Eq. (4.9)), com a representação fundamental do grupo  $SU(N)$  em ambos sítios.

$$N_f = \sum_{J=0}^{S-\frac{1}{2}} (4J+1) \quad (4.48)$$

$$= 4 \times \frac{(S-\frac{1}{2})(S+\frac{1}{2})}{2} + S + \frac{1}{2} \quad (4.49)$$

$$= S(2S+1) \quad (4.50)$$

Para valores inteiros de  $S$ , somando sobre multipletos de momento angular total ímpar, encontramos

$$N_f = \sum_{J=1}^S \deg(2J-1) \quad (4.51)$$

$$= \sum_{J=1}^S (4J-1) \quad (4.52)$$

$$= 4 \times \frac{S(S+1)}{2} - S \quad (4.53)$$

$$= S(2S+1) \quad (4.54)$$

Assim como na Seção anterior, deslocamos a energia por um fator  $-E_1$ . Depois do deslocamento, os estados excitados passam a ter energia zero, e ficamos com a soma sobre os projetores de multipletos do estado fundamental

$$H_{SU(N)b} = -R \sum_{J=0}^{2S} \begin{cases} P_{2J} & , \text{ se } 2S \text{ é ímpar} \\ P_{2J+1} & , \text{ se } 2S \text{ é par} \end{cases} \quad (4.55)$$

onde, novamente,  $-R = E_0 - E_1 < 0$ . Usando o projetor em multipletos, Eq. (5.2), encontramos o Hamiltoniano invariante sob transformações  $SU(N)$ . Explicitamente, calculando Eq. (4.55), chegamos aos valores da Tabela 4.2.

Assim como no caso anterior, usando a Eq. (4.4) faz com que consigamos reescrever o Hamiltoniano em termos de TEIs. Este caso é menos relevante para o diagrama de fases que trataremos no Capítulo seguinte, portanto, não prosseguiremos nesta rota.

## 4.6 Conclusões

Neste Capítulo, desenvolvemos a teoria necessária para o tratamento de cadeias de spin usando a linguagem de TEIs. Em particular, fomos capazes de escrever o Hamiltoniano mais geral invariante por rotações e reversão temporal em termos de TEIs, uma vez que identificamos os operadores escalares nesta linguagem. Além disso, identificamos que sempre há pontos no espaço de parâmetros onde o Hamiltoniano de spin  $S$  apresenta simetria explícita  $SU(2S+1)$ . São esses os ingredientes básicos a partir dos quais construiremos o método de SDRG que permitirá o mapeamento do diagrama de fases desta classe de sistemas de spin. Como o caso de spin  $S = \frac{1}{2}$  apresenta somente acoplamentos do tipo Heisenberg (já que as matrizes de Pauli quadram para um) e o caso de spin 1 foi tratado no Capítulo 3, nos focaremos majoritariamente em spins  $\frac{3}{2}$  e 2.

## Capítulo 5

# Cadeias de spin desordenadas invariantes por rotações

### 5.1 Breve Introdução: Sistemas invariantes por transformações SU(2)

Neste Capítulo, seguimos o estudo de cadeias de spins desordenadas, mapeando o diagrama de fases das cadeias de spin de spin  $S$  invariantes por rotações. Os resultados deste Capítulo encontram-se publicados em [66].

O Hamiltoniano do sistema, escrito em termos de TEIs, foi introduzido no Capítulo anterior,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} \mathcal{H}_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} \sum_{J=0}^{J_{\text{max}}} K_i^{(J)} \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}). \quad (5.1)$$

A motivação para estudar este problema não é somente teórica, mas também experimental. A relevância experimental de sistemas com um grande número de graus internos de liberdade vem da possibilidade de sua realização em sistemas de matéria condensada ou, mais promissoramente, em sistemas de átomos frios em redes ópticas. Candidatos incluem os bósons alcalinos, como o  $^{23}\text{Na}$  e  $^{87}\text{Rb}$ , além de férmions alcalinos ( $^{132}\text{Cs}$ ) e alcalinos terrosos ( $^9\text{Be}$ ,  $^{135}\text{Ba}$ ,  $^{137}\text{Ba}$ ,  $^{87}\text{Sr}$  or  $^{173}\text{Yb}$ ). No limite isolante de Mott, os termos relevantes para a descrição da interação spin-spin vão além do termo de Heisenberg. [50, 67, 51, 68]

Em alguns outros casos, o sistema possui uma simetria explícita maior que a simetria SU(2) usual. Por exemplo, para o caso de férmions de spin  $\frac{3}{2}$ , uma simetria SO(5) exata foi descoberta sem haver a necessidade de ajuste fino de acoplamentos [67, 68]. No caso de átomos alcalinos terrosos, o spin total é de origem puramente nuclear e desacoplado da dinâmica restante. Estes são graus de liberdade que realizam uma simetria SU( $N > 2$ ) [69, 70], como no caso de  $^{87}\text{Sr}$  ( $N = 10$ ) [71] ou  $^{173}\text{Yb}$  ( $N = 6$ ) [72]. Um estado isolante de Mott SU(6) também foi realizado em  $^{173}\text{Yb}$  [73], mesmo com a impossibilidade de abaixar a temperatura em escala inferior àquela provinda pelo acoplamento de spins.

É relevante notar que no Hamiltoniano de spins que descreve o setor de baixas energias de um sistema de átomos frios em redes ópticas comensuráveis, com espalhamentos de onda  $s$  sendo considerados, somente estados de momento angular total de pares de spins com valores ímpares estão presentes. Tal seleção é consequência da simetria (ou anti-simetria) da função de onda de um par de átomos bosônicos (ou fermiônicos) [29]. Para fazer a conexão do Hamiltoniano Eq. 4.9 com estados de momento angular total de pares com valores bem definidos, começamos por escrever o projetor nestes estados. Para um par de spins  $S$ , o projetor em um estado de momento angular total  $\tilde{S}$  é [54]

$$P_{\tilde{S}}(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) = \prod_{\sigma \neq \tilde{S}} \frac{(2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + 2S(S+1) - \sigma(\sigma+1))}{\tilde{S}(\tilde{S}+1) - \sigma(\sigma+1)}, \quad (5.2)$$

$$= \sum_{M=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} |\tilde{S}M\rangle \langle \tilde{S}M|, \quad (5.3)$$

onde  $\sigma = 0, 1, \dots, 2S$ . Quando escrito em termos de projetores nos estados de momento angular total, o Hamiltoniano toma a forma seguinte

$$\mathcal{H} = \sum_i \sum_{J=0}^{J_{\text{max}}} \epsilon_i^{(J)} P_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}). \quad (5.4)$$

Descrição	Notação
Acoplamento do produto escalar de operadores nos sítios $i$ e $i + 1$ , potência $n$	$\alpha_i^{(n)}$
Acoplamento de tensores de ordem $J$ nos sítios $i$ e $i + 1$	$K_i^{(J)}$
Operador tensorial esférico de ordem $J$ , componente $M$ , spin $\mathbf{S}$	$Y_{J,M}(\mathbf{S})$
Projeter em um multipletto de momento angular total $\tilde{S}$	$P_{\tilde{S}}(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$
Acoplamento de um projetor no estado de momento angular total $J$ , sítios $i$ e $i + 1$	$\epsilon_i^{(J)}$

Tabela 5.1: Notação usada neste Capítulo.

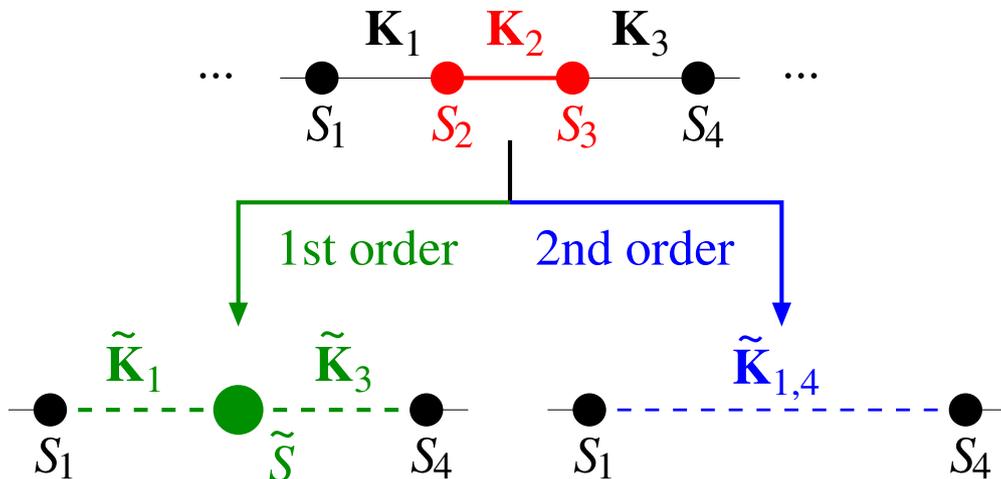


Figura 5.1: Representação esquemática do procedimento de dizimação. Os spins dizimados podem ser completamente eliminados da cadeia ou substituídos por um spin efetivo  $\tilde{S}$ , dependendo do multipletto fundamental do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{2,3}$ . O conjunto de constantes de acoplamento renormalizadas  $\tilde{\mathbf{K}}$  é dado nas Eqs. (5.12) e (5.22).

Voltaremos ao Hamiltoniano escrito na forma da Eq. (5.4) posteriormente, assim como o mapeamento  $\epsilon_i^{(J)} \rightleftharpoons K_i^{(J)}$ . Para a Seção seguinte, onde o procedimento de SDRG será desenvolvido, é mais conveniente usar a forma da Eq. (5.1).

## 5.2 Procedimento de Grupo de Renormalização

Neste Seção, mostraremos como o procedimento geral explicado no Capítulo 2 pode ser aplicado a Hamiltonianos que seguem a Eq. (5.1).

O procedimento de GR será encontrar o maior gap local  $\Delta_i$ ,  $\Omega = \max \{\Delta_i\}$ , que será o “cutoff” de energia e determinará os sítios onde a dizimação será feita. Seja  $\mathcal{H}_{i,i+1}$  o Hamiltoniano que acopla os spins  $S_i$  e  $S_{i+1}$ . Suponhamos que  $i = 2$  e  $\Omega = \Delta_2$ . O Hamiltoniano de 4 sítios, que inclui os sítios vizinhos ao par de spins 2 e 3, é

$$\mathcal{H}_{4\text{sites}} = \mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{2,3} + \mathcal{H}_{3,4}. \quad (5.5)$$

Já que o maior gap é gerado pela interação local dos spins  $S_2$  e  $S_3$ , trataremos  $\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}$  como perturbação de  $\mathcal{H}_{2,3}$ .

Vamos agora mostrar como calcular o passo de dizimação. A Fig. 5.1 resume o processo de dizimação e pode ser usada de guia durante a leitura dos passos detalhados que faremos a seguir.

### 5.2.1 Teoria de perturbação de primeira ordem

Nos casos onde o multipletto fundamental do problema de dois spins não é um singlete, é geralmente suficiente tratar o problema usando teoria de perturbação de primeira ordem. O passo de dizimação consiste em congelar os spins  $S_2$  e  $S_3$  em seu multipletto fundamental. Conforme mostraremos em mais detalhes a seguir, isso é equivalente a substituí-los por um spin efetivo  $\tilde{S}$ . Os acoplamentos renormalizados  $\tilde{K}_{1,3}^{(J)}$ , que conectam o spin  $\tilde{S}$  aos spins  $S_{1,4}$ , são obtidos projetando  $\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}$  no multipletto de estados degenerados. Mostraremos também

que o Hamiltoniano projetado tem a mesma forma funcional que o Hamiltoniano original, o que vai permitir a iteração dos passos do SDRG.

Vamos agora ao passo-a-passo de como proceder sob a óptica do SDRG. Projetando  $\mathcal{H}_{1,2}$  no multipletto fundamental de momento angular  $\tilde{S}$ , obtemos

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,2}^{(1)} = \sum_{J=0}^{J_{\max}} K_1^{(J)} \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{JM}(\mathbf{S}_1) [P_{\tilde{S}} Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}}], \quad (5.6)$$

onde  $P_{\tilde{S}}$  é o projetor na Eq. (5.2). O subscrito (1) em  $\tilde{\mathcal{H}}_{1,2}^{(1)}$  indica que a correção é feita em primeira ordem de teoria de perturbação. A projeção de  $\mathcal{H}_{3,4}$  segue de maneira análoga.

Usando o projetor da Eq. (5.2) explicitamente, encontramos que esta é dada por

$$\begin{aligned} P_{\tilde{S}} Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} &= \left( \sum_{M'} |\tilde{S}M'\rangle \langle \tilde{S}M'| \right) Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) \left( \sum_{M''} |\tilde{S}M''\rangle \langle \tilde{S}M''| \right), \\ &= \sum_{M'} |\tilde{S}M'\rangle \sum_{M''} \langle \tilde{S}M''| \langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | \tilde{S}M'' \rangle. \end{aligned}$$

Usaremos o TWE [54], Eq. (4.30), para manipular o elemento de matriz  $\langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | \tilde{S}M'' \rangle$ . De acordo com o teorema, este elemento de matriz é proporcional a  $\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle$  e ao coeficiente de Clebsch-Gordan  $\langle J\tilde{S}; -MM'' | J\tilde{S}; \tilde{S}M' \rangle$ . Para podermos escrever o Hamiltoniano em termos de um novo spin  $\tilde{S}$ , usamos o TWE mais uma vez para calcular  $\langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S}M'' \rangle$ , onde  $\mathbf{S}_2$  foi substituído por  $\tilde{\mathbf{S}}$ . O elemento de matriz de  $Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}})$  é proporcional a  $\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle$  e ao mesmo coeficiente de Clebsch-Gordan, o que implica que

$$\frac{\langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | \tilde{S}M'' \rangle}{\langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S}M'' \rangle} = \frac{\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle}{\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle}. \quad (5.7)$$

Isolando o elemento de matriz  $\langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | \tilde{S}M'' \rangle$  na equação acima, chegamos em

$$P_{\tilde{S}} Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} = \frac{\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle}{\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle} \sum_{M'} \sum_{M''} |\tilde{S}M'\rangle \langle \tilde{S}M' | Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S}M'' \rangle \langle \tilde{S}M''|, \quad (5.8)$$

$$= \frac{\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle}{\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle} P_{\tilde{S}} Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}) P_{\tilde{S}}, \quad (5.9)$$

$$= f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S}) P_{\tilde{S}} Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}) P_{\tilde{S}} \quad (5.10)$$

sendo que a função  $f^{(J)}$  não depende de  $M$ . Esta é uma característica importante do passo de dizimação, e que garante a manutenção da simetria  $SU(2)$  do Hamiltoniano efetivo.

A Eq. (5.10) é parte fundamental do processo de dizimação, e mostra que o Hamiltoniano renormalizado tem a mesma forma funcional que o Hamiltoniano original. Deixaremos o cálculo da razão dos elementos de matriz reduzidos que define  $f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S})$  para o Apêndice E. Para os acoplamentos, concluímos, portanto, que

$$\tilde{K}_1^{(J)} = f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S}) K_1^{(J)}. \quad (5.11)$$

Para o acoplamento efetivo entre  $\tilde{S}$  e  $S_3$ , o cálculo pode ser feito seguindo os mesmos passos, com a substituição  $S_2 \rightleftharpoons S_3$ . Os acoplamentos vizinhos  $K_1^{(J)}$  e  $K_3^{(J)}$  são renormalizados, então, de acordo com

$$\tilde{K}_1^{(J)} = f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S}) K_1^{(J)}, \quad \tilde{K}_3^{(J)} = f^{(J)}(S_3, S_2, \tilde{S}) K_3^{(J)}, \quad (5.12)$$

enquanto o conjunto de acoplamentos  $\{K_2^{(J)}\}$  é removido da cadeia. Esta é uma generalização para tensores de ordem maior do procedimento de GR mostrado por Westerberg *et. al.* [26].

O Hamiltoniano renormalizado, que conecta o spin  $\mathbf{S}_1$  com o spin efetivo  $\tilde{\mathbf{S}}$  após a dizimação, fica sendo

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,2}^{(1)} = \sum_{J=0}^{J_{\max}} \tilde{K}_1^{(J)} \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{JM}(\mathbf{S}_1) Y_{J-M}(\tilde{\mathbf{S}}), \quad (5.13)$$

$$= \sum_{J=0}^{J_{\max}} \tilde{K}_1^{(J)} \hat{O}_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}). \quad (5.14)$$

e analogamente para  $\tilde{\mathcal{H}}_{3,4}^{(1)}$ .

É interessante notar que o acoplamento efetivo  $\tilde{K}_1^{(J)}$  pode ser nulo mesmo se  $\tilde{S} \neq 0$ . De fato, há duas possibilidades onde a renormalização encontrada acima se anula:

**Caso (i): Se a ordem do tensor  $J$  é maior que  $2\tilde{S}$ .** Se este é o caso, a projeção é zero pelo simples fato que o momento angular é conservado. Um exemplo é quando  $S_2 = S_3 = 3/2$  (portanto,  $J_{\max} = 3$ ), a ordem do tensor é  $J = J_{\max} = 3$  e o spin efetivo é  $\tilde{S} = 1$ . Este caso aparecerá futuramente no estudo de cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ .

**Caso (ii): Se a função  $f^{(J)}$  se anula em alguma combinação de  $S_2$ ,  $S_3$  e  $\tilde{S}$  não contemplada na regra (i).** Por exemplo, se  $S_2 = S_3 = \frac{3}{2}$  e  $J = \tilde{S} = 2$ ,  $f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S}) = 0$ . Note que  $J < 2\tilde{S}$  e, então, a regra (i) não é violada. Como não há maneira genérica de saber quando estes anulamentos das constantes de acoplamento ocorrerão, as consequências devem ser analisadas caso a caso, dependendo dos spins e ordem dos tensores.

O caso de tensores de ordem mais baixa  $J = 1$ , isto é, o Hamiltoniano de Heisenberg, foi estudado em detalhes previamente [27, 26] (ver os resultados citados no Capítulo 2). É importante notar, em particular, que os acoplamentos efetivos com  $J = 1$  nunca se anulam, desde que  $\tilde{S} \neq 0$ .

É também relevante notar que os novos spins gerados  $\tilde{S}$  não são necessariamente iguais àqueles removidos da cadeia. A caracterização completa do fluxo do SDRG envolve, portanto, determinar o modo como a distribuição conjunta de acoplamentos e de spins flui conforme a escala de energia  $\Omega$  é reduzida.

Destacamos, por fim, que os cálculos acima assumem que o estado fundamental do problema de dois spins tem um spin bem definido  $\tilde{S}$ . O caso em que o estado fundamental é composto por mais de um multipletto de spin requer um procedimento de SDRG mais elaborado. Como essa degenerescência de multipletos só ocorre quando os acoplamentos do Hamiltoniano são finamente ajustados, este caso não será contemplado em nosso trabalho.

### 5.3 Teoria de Perturbação de Segunda Ordem envolvendo singletos

Quando o spin do estado fundamental do problema de dois spins é igual a zero, a teoria de perturbação de primeira ordem se anula e a análise das correções de segunda ordem é necessária. Vamos começar enunciado o resultado do cálculo, para depois mostramos os detalhes. O par de spins  $S_2$  e  $S_3$  é congelado em um estado de singlete e acoplamentos entre os sítios vizinhos 1 e 4 surgem devido a flutuações virtuais do singlete. Além disso, acoplamentos de tensores de ordens diferentes não são misturados no processo.

Vamos então aos cálculos detalhados. Chamemos  $S \equiv S_2 = S_3$ , já que uma condição necessária para formação de singletos é que os spins nos dois sítios sejam iguais. De maneira geral, a renormalização do Hamiltoniano via segunda ordem de teoria de perturbação é dada por [54]

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = P_0 (\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}) \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}} \tilde{P} (\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}) P_0, \quad (5.15)$$

onde  $E_0$  é a energia do singlete,  $P_0$  é o projetor no estado de singlete e  $\tilde{P} = 1 - P_0$  é a projeção em outros multipletos  $J' = 1, \dots, 2S$ . Negligenciando termos constantes, chegamos a

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = P_0 \mathcal{H}_{1,2} \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}} \tilde{P} \mathcal{H}_{3,4} P_0 + \text{H.c.} \quad (5.16)$$

Escrevendo  $\mathcal{H}_{1,2}$  e  $\mathcal{H}_{3,4}$  explicitamente, chegamos ao desafio de calcular  $P_0 Y_{J-M}(\mathbf{S}) \tilde{P}$ . Denotemos por  $J' \neq 0$  um estado de momento angular total presente no operador de projeção  $\tilde{P}$ . Pelo TWE [54], o único valor de  $J'$  que contribui para a soma é o valor  $J' = J$ , isto é,  $\langle 00 | Y_{J-M}(\mathbf{S}) | J'M' \rangle \propto \delta_{J,J'} \delta_{M,M'}$ . Portanto, somente o tensor cuja ordem é igual ao momento angular total do par contribui para a teoria de perturbação de segunda ordem. Definindo  $\tilde{J}_{\max} = \min(J_{\max}, 2S)$  e  $\Delta E(0, J) < 0$  sendo a diferença entre a energia do estado fundamental (singlete) e do estado excitado de momento angular total  $J$ , temos

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = 2 \sum_{J=1}^{\tilde{J}_{\max}} K_1^{(J)} K_3^{(J)} \sum_{M=-J}^J \frac{\langle 00 | Y_{J-M}(\mathbf{S}) | JM \rangle \langle JM | Y_{JM}(\mathbf{S}) | 00 \rangle}{\Delta E(0, J)} Y_{JM}(\mathbf{S}_1) Y_{J-M}(\mathbf{S}_4). \quad (5.17)$$

Vamos calcular explicitamente a dependência em  $M$  da equação acima. Para isso, analisemos em detalhes o produto de elementos de matriz  $\langle 00 | Y_{J-M}(\mathbf{S}) | JM \rangle \langle JM | Y_{JM}(\mathbf{S}) | 00 \rangle$ , usando o TWE. Como os elementos de

matrizes reduzidas são independentes de  $M$ , a dependência em  $M$  pode vir somente dos coeficientes de Clebsch-Gordan correspondentes,  $\langle JJ; -MM | JJ; 00 \rangle$  e  $\langle J0; M0 | J0; JM \rangle$ . Estes símbolos de Clebsch-Gordan são dados por

$$\langle JJ; -MM | JJ; 00 \rangle = \frac{(-1)^{J+M}}{\sqrt{1+2J}}, \quad (5.18)$$

$$\langle J0; M0 | J0; JM \rangle = 1. \quad (5.19)$$

Multiplicando ambos, encontramos que a dependência em  $M$  é  $(-1)^M$  e, portanto, o produto pode ser escrito como

$$\langle 00 | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | JM \rangle \langle JM | Y_{JM}(\mathbf{S}_3) | 00 \rangle = (-1)^M g(J, S). \quad (5.20)$$

É importante destacar que nem o denominador de energia  $\Delta E(0, J)$  e nem a função  $g(S, J)$  dependem de  $M$ , o que evidencia a simetria  $SU(2)$  do Hamiltoniano renormalizado.

Conclui-se, portanto, que o Hamiltoniano renormalizado acopla os sítios 1 e 4 e tem a forma seguinte

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = \sum_{J=1}^{\tilde{J}_{\max}} \tilde{K}_{1,4}^{(J)} \hat{O}_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4), \quad (5.21)$$

onde as constantes de acoplamento renormalizadas são dadas por

$$\tilde{K}_{1,4}^{(J)} = 2 \frac{g(S_2, J)}{\Delta E(0, J)} K_1^{(J)} K_3^{(J)}. \quad (5.22)$$

Das Eqs. (5.12) e (5.22), fica claro a motivação para trabalharmos com TEIs. Sob transformações do SDRG, somente são gerados  $\tilde{K}_{i,j}^{(J)}$  com  $J$  igual ao dos acoplamentos originais. Este fato simplifica substancialmente o estudo do fluxo, justifica o trabalho com TEIs e faz com que vários dos pontos fixos sejam escritos de maneira simples.

Em resumo, determinamos o procedimento de dizimação que permite tratar Hamiltonianos *genéricos* isotrópicos de spin  $S$ , a menos de alguns casos em que os acoplamentos gerados em teoria de perturbação de primeira ordem são nulos.

## 5.4 Pontos fixos AFs e a classificação de estabilidade

A partir desta Seção, aplicaremos o procedimento de dizimação mostrado anteriormente para o Hamiltoniano de spins, Eq. (5.1), o que envolve determinar os pontos fixos do fluxo e a classificação de sua estabilidade.

Conforme enfatizado nas Seções 5.2 e 5.3, uma das razões pelas quais o uso de TEIs é conveniente é que tensores de diferentes ordens não são misturados pelo procedimento de SDRG. Como consequência, se começarmos dizimando uma cadeia cujos spins estão acoplados por operadores que sejam TEIs de ordem definida, por exemplo, igual a  $I$ , então todos os passos de dizimação manterão os acoplamentos com  $J \neq I$  iguais a zero. Portanto, podemos já concluir que  $K_i^{(I)} \neq 0$  e  $K_i^{(J \neq I)} = 0$  é um ponto fixo do fluxo. A tarefa que resta é calcular a distribuição de acoplamentos no ponto fixo  $\mathcal{P}_I^*(K)$ .

### 5.4.1 Fase de singletos aleatórios com $\psi = \frac{1}{2}$

Vamos começar a analisar o diagrama de fases nos focando no caso mais simples: quando o estado fundamental do problema de dois spins é sempre um singlete (Seção 5.3). Mais a frente argumentaremos que este é o caso numa grande sub-região do espaço de parâmetros. Como consequência de todas as dizimações serem de segunda ordem, o tamanho dos spins se mantém fixo e igual ao valor inicial  $S$ . O fluxo do SDRG envolve, então, somente a evolução não-trivial das distribuições de acoplamentos que, no regime de desordem forte (a menos de transientes irrelevantes), é idêntica ao da cadeia de spin  $\frac{1}{2}$ , discutido no Capítulo 2 [2]. Para acoplamentos de tensores de ordem  $I$ , que são assumidos serem fortemente desordenados no início do fluxo, a distribuição assintótica é

$$\mathcal{P}_I^*(K) = \frac{\psi^{-1} - 1}{\Omega \ln \Omega} \left( \frac{\Omega}{K} \right)^{1 - \frac{\psi^{-1} - 1}{\ln \Omega}}, \quad (5.23)$$

sendo  $\psi = \frac{1}{2}$  o expoente de tunelamento universal e  $0 < K < \Omega$  [2]. Adicionalmente,  $\mathcal{P}_J^*(K) = \delta(K)$ , para  $J \neq I$ .

Vamos agora delimitar uma região no subespaço de parâmetros onde temos a garantia de só haver dizimações de segunda ordem. O ingrediente necessário para que as dizimações sejam de segunda ordem é que os novos acoplamentos gerados sejam tais que o estado fundamental se mantenha sendo singleto. Esse sempre é o caso se  $(-1)^{I+1} K_i^{(I)} \geq 0$ , conforme mostraremos logo na sequência. Tal região corresponde a um hiper-octante no espaço de parâmetros. Numa cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ , por exemplo, corresponde ao octante tridimensional  $K^{(1)} > 0$ ,  $K^{(2)} < 0$  e  $K^{(3)} > 0$ .

#### 5.4.1.1 Pontos fixos sobre os eixos onde o singleto é o estado fundamental

Quando nos focamos em dizimações sobre os eixos, somente tensores de uma determinada ordem digamos, igual a  $J$ , são não nulos. A energia do multipletto de momento angular total  $J'$ ,  $E_J(J')$ , pode ser encontrada usando a Eq. (4.41) em um autoestado genérico do Hamiltoniano  $|SS; J'M'\rangle$ .

$$E_J(J') = \langle SS; J'M' | \hat{O}_J | SS; J'M' \rangle, \quad (5.24)$$

$$= (-1)^{2S+J'} \left\{ \begin{matrix} J' & S & S \\ J & S & S \end{matrix} \right\} (2S+1) |\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2 \quad (5.25)$$

Note que a simetria  $SU(2)$  do Hamiltoniano se reflete no fato que a energia do sistema é independente de  $M'$ . Usando a Eq. (E.3), é possível calcular o elemento de matriz reduzido  $\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle$  mas, por enquanto, tal cálculo não é necessário. Como  $J$  e  $S$  são fixos, trabalhamos com a seguinte razão

$$\begin{aligned} \tilde{E}_J(J') &= \frac{E_J(J')}{(-1)^{2S} (2S+1) |\langle S || Y_J(\mathbf{S}) || S \rangle|^2} \\ &= (-1)^{J'} \left\{ \begin{matrix} J' & S & S \\ J & S & S \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (5.26)$$

A tarefa de minimizar (ou maximizar, dependendo de  $J$  e  $S$ ) o lado direito envolve o valor mínimo (ou máximo) do símbolo  $6j \left\{ \begin{matrix} J' & S & S \\ J & S & S \end{matrix} \right\}$ . Não é possível escrever uma expressão analítica simples para tal símbolo mas, por cálculo numérico explícito, verificamos que a condição de extremização é satisfeita quando  $J' = 0$ . Isto nos fornece evidência sólida que o singleto seja o estado fundamental quando  $(-1)^J K^{(J)} > 0$ .

Uma visão geométrica do problema pode ser obtida considerando as constantes de acoplamento  $\mathbf{K}_i = (K_i^{(1)}, \dots, K_i^{(J_{\max})})$  como definindo uma hipersfera no espaço  $\mathbb{R}^{J_{\max}}$ . Nesta hipersfera, representada na Fig. 5.2, cada semi-eixo, no qual as dizimações são tais que singletos são formados, define um ponto fixo. Estes semi-eixos podem ser escritos de maneira geral como

$$K_i^{(1)} > 0, K_i^{(2)} < 0, K_i^{(3)} > 0, \dots \quad (5.27)$$

ou  $(-1)^{J+1} K_i^{(J)} > 0$ .

#### 5.4.1.2 Estabilidade dos pontos fixos

Uma vez encontrado este conjunto de pontos fixos de desordem infinita, a questão natural é se estes são estáveis ou não, e quais são suas bacias de atração. Começemos pela análise da estabilidade. Para spins  $S$ , a ordem do acoplamento máximo é  $J_{\max} = 2S$  e existem, portanto,  $J_{\max} - 1$  direções perpendiculares nas quais o ponto fixo pode ser perturbado. Chamemos de  $\delta_i^{(J)}$  o desvio dos acoplamentos no sítio  $i$ , inicialmente não-nulos na direção  $I$ , perturbados na direção  $J$ , sendo  $J \neq I$ , isto é,  $\delta_i^{(J)} = \frac{K_i^{(J)} - K_i^{(J)*}}{K_i^{(I)}}$ , sendo  $K^{(J)*} = 0$  o valor no ponto fixo. Em ordem mais baixa não-nula para  $\delta^{(J)}$ , as relações (5.22) se tornam

$$\tilde{\delta}_{1,4}^{(J)} \propto \delta_1^{(J)} \delta_3^{(J)}, \quad (5.28)$$

onde negligenciamos o pré-fator numérico, cuja magnitude é da ordem da unidade, e irrelevante no regime de desordem forte. Seguindo os mesmos passos da Ref [2], pode-se mostrar que o valor típico de  $\ln |\tilde{\delta}_i^{(J)}|$  flui a zero como

$$\ln |\tilde{\delta}_i^{(J)}| \sim -c\Gamma^\phi, \quad (5.29)$$

sendo  $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  a razão áurea e  $\Gamma = -\log \Omega$ . Além disso, o valor típico de  $\delta$  se anula como  $\delta_{typ}^{(J)} \sim \exp(-c\Gamma^\phi)$ . Perturbações em quaisquer direções perpendiculares são irrelevantes (no sentido do grupo de renormalização). Conclui-se, portanto, que todos os  $J_{\max}$  pontos fixos que moram sobre semi-eixos são estáveis com respeito a perturbações que respeitem a simetria  $SU(2)$  e perturbem em direções perpendiculares aos eixos.

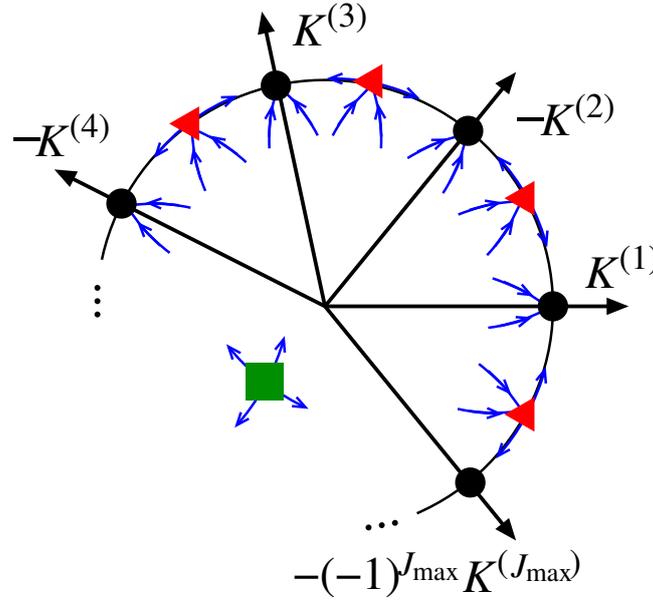


Figura 5.2: Representação esquemática do hiper-octante que contém todos os pontos fixos AF totalmente estáveis, aqui representados por círculos pretos nos semi-eixos  $(-1)^{J+1} K^{(J)}$ . Pontos fixos AF semi-estáveis existem nos hiper-planos formados por duas ou mais direções coordenadas. Triângulos vermelhos representam o caso de duas direções coordenadas. Existem também pontos totalmente instáveis (quadrados verdes) no meio do hiper-octante. Este ponto totalmente instável é simétrico por transformações do grupo  $SU(2S+1)$ , enquanto os outros pontos fixos têm simetria  $SU(2S+1)$  emergente, uma generalização dos “mésons”  $SU(3)$  discutidos no Capítulo 3.

#### 5.4.1.3 Outros pontos fixos antiferromagnéticos de $\psi = \frac{1}{2}$

Partimos agora para a busca de outros pontos fixos onde o estado fundamental do problema de dois spins é um singlete, mas que não sejam localizados sobre eixos. Para tanto, reescrevendo as equações do GR, Eq. 5.22, em termos de variáveis angulares. Consideremos, como exemplo, o caso em que  $K_i^{(1)}$  é não-nulo e definamos  $s^{(J)} = \frac{K^{(J)}}{K^{(1)}}$ , ( $2 \leq J \leq J_{\max}$ ). As relações de recorrência do SDRG (5.22) se tornam

$$\tilde{K}_{1,4}^{(1)} = \Sigma^{(1)}(S, \mathbf{s}_2) \frac{K_1^{(1)} K_3^{(1)}}{K_2^{(1)}}, \quad (5.30)$$

$$\tilde{s}_{1,4}^{(J)} = \Xi^{(J)}(S, \mathbf{s}_2) s_1^{(J)} s_3^{(J)}, \quad J = 2, \dots, J_{\max}. \quad (5.31)$$

onde  $\mathbf{s}_i = \{s_i^{(2)}, \dots, s_i^{(J_{\max})}\}$  denota o conjunto das  $J_{\max} - 1$  variáveis angulares e  $S_2 = S_3 = S$  é o valor do spin. Note que as funções  $\Sigma^{(1)}(S, \mathbf{s}_2)$  e  $\Xi^{(J)}(S, \mathbf{s}_2) = \Sigma^{(J)}/\Sigma^{(1)}$  são funções *somente dos ângulos*, e independentes de  $K_2^{(1)}$ . O fato de que  $\tilde{s}_{1,4}^{(J)}$  depende somente do vetor  $\mathbf{s}_2$  é o que permite achar pontos fixos AF onde o vetor  $\mathbf{s}$  é mantido constante. É isso que faremos a partir de agora. No ponto fixo, o vetor  $\mathbf{s}_i$  é o mesmo em todos os sítios. Denotemos por  $\mathbf{s}^*$  seu valor. A regra de dizimação é

$$s^{(J)*} = \Xi^{(J)}(S, \mathbf{s}^*) s^{(J)*} s^{(J)*}. \quad (5.32)$$

Note que, se  $s^{(J)*} \neq 0$ , temos que  $\Xi^{(J)*} s^{(J)*} = 1$ . De maneira genérica, resolvendo o conjunto de  $J_{\max} - 1$  equações acopladas (5.32) obtemos todos os pontos fixos AF que não estão localizados sobre os eixos, e os quais chamaremos de “pontos fixos angulares”. O pré-fator  $\Xi^{(J)}(S, \mathbf{s}^*)$  depende de maneira não trivial de  $S$  e  $\mathbf{s}^*$ , o que não permite uma solução genérica para valores genéricos de spin  $S$ . Repare que a não trivialidade está relacionada com o fato de que o denominador de energia, na teoria de perturbação de segunda ordem, é não trivial. Esta é uma consequência de trabalharmos com TEIs: o cálculo perturbativo fica estruturalmente simples, exceto pelos denominadores de energia. Resolveremos explicitamente a Eq. (5.32) nos casos de spins  $S = \frac{3}{2}$  e  $S = 2$ .

A pergunta natural a se fazer é se esses pontos fixos de ângulo constante são estáveis ou não. Como veremos agora, a estabilidade depende do tipo de perturbação que adicionamos ao sistema. Assumamos um ponto fixo conhecido e dado pelo vetor  $\mathbf{s}^*$ . Definindo  $\delta^{(J)} = s^{(J)} - s^{(J)*}$  e expandindo a Eq. (5.31) em ordem quadrática

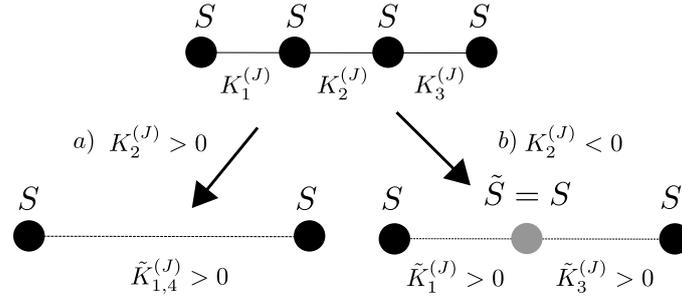


Figura 5.3: Ingredientes básicos para uma fase de singletos aleatórios de expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ . Neste exemplo, começamos com  $K_i^{(J)} < 0$  em todas as ligações, onde dizimações de primeira ordem são assumidas ocorrerem, com o estado fundamental do problema de dois spins tendo  $\tilde{S} = S$ . Em primeira ordem de teoria de perturbação, acoplamentos com  $K_i^{(J)} > 0$  e spins efetivos  $\tilde{S} = S$  são gerados (dizimação do tipo (b) na Figura). O problema de dois spins com  $K_i^{(J)} > 0$  é assumido ter um singlete de estado fundamental (dizimação representada com (a) na Figura). A dizimação de segunda ordem mantém o sinal de  $K_i^{(J)}$ . Assintoticamente, metade das dizimações são do tipo (a) e metade são do tipo (b), ingredientes necessários e suficientes para uma fase de expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ .

em  $\delta$ , chegamos a

$$\tilde{\delta}_{1,4}^{(J)} = s^{(J)*} \Xi^{(J)*} \left( \delta_1^{(J)} + \delta_3^{(J)} \right) + s^{(J)*} \sum_{K=2}^{J_{\max}} \gamma^{(K)*} \delta_2^{(K)} + \Xi^{(J)*} \delta_1^{(J)} \delta_3^{(J)}, \quad (5.33)$$

onde  $\gamma^{(K)*} = \left. \frac{\partial \Xi^{(J)}}{\partial s_2^{(K)}} \right|_{s_2=s^*}$ . Usando que, para  $s^{(J)*} \neq 0$ , temos  $\Xi^{(J)*} s^{(J)*} = 1$ , e mantendo somente os termos não nulos de ordem mais baixa em  $\tilde{\delta}_{1,4}^{(J)}$ , podemos reescrever a Eq. (5.33) como

$$\tilde{\delta}_{1,4}^{(J)} = \begin{cases} \delta_1^{(J)} + \delta_3^{(J)} + s^{(J)*} \sum_{K=2}^{J_{\max}} \gamma^{(K)} \delta_2^{(K)}, & \text{para } s^{(J)*} \neq 0, \\ \Xi^{(J)} \delta_1^{(J)} \delta_3^{(J)}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.34)$$

Fica evidente, então, que para  $s^{(J)*} \neq 0$ ,  $\tilde{\delta}^{(J)}$  é caracterizado por um passeio aleatório, o que implica que seu desvio padrão cresce de maneira ilimitada. Mais precisamente,  $|\tilde{\delta}^{(J)}| \sim \delta_0 \Gamma^{\alpha_{\text{asym}}} + \sigma_{0,\delta} \Gamma^{\alpha_{\text{sym}}}$ , com  $\alpha_{\text{asym}} = \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{5 + 4s^{(J)*} \gamma^{(J)*}} \right)$  e  $\alpha_{\text{sym}} = \frac{1}{4} \left( 1 + \sqrt{5 + 4 \left( s^{(J)*} \gamma^{(J)*} \right)^2} \right)$ , sendo  $\delta_0$  e  $\sigma_{0,\delta}$  a média e o desvio padrão da distribuição de  $\delta^{(J)}$  [2].

Concluindo, perturbações nas direções  $J$  nas quais  $s^{(J)*} \neq 0$  são relevantes. Por outro lado, se  $s^{(J)*} = 0$ , daí a equação (5.34) recupera (5.28), isto é, os valores típicos de  $|\delta^{(J)}| \sim \exp(-c\Gamma^\phi)$ , o que quer dizer que perturbações na direção paralela a esta são irrelevantes. Na Fig. 5.2, representamos esquematicamente estes pontos fixos AF e suas estabilidades.

Nesta Seção, encontramos um grande número de pontos fixos AF presentes no que chamamos de *octante AF*, onde  $(-1)^J K^{(J)} > 0$ . É interessante notar que todos os pontos fixos encontrados apresentam estados fundamentais compostos por singletos do problema de dois spins, que são idênticos. Conforme mostraremos em detalhes posteriormente, este fato implica em uma simetria emergente “mesônica”, mas agora estendida ao grupo  $SU(N)$ , com  $N = 2S + 1$ .

Até o momento, nos focamos nos pontos fixos AF nos quais somente dizimações de segunda ordem, que formam singletos, ocorrem. Naturalmente, existem outros pontos fixos nos quais o valor  $S$  do spin não é uniforme. Muitos destes são relacionados à mistura de acoplamentos FM e AF, e fluem para uma LSP [26]. Estes casos também serão tratados posteriormente neste Capítulo.

## 5.4.2 Fases de singletos aleatórios de $\psi = \frac{1}{3}$

No nosso Hamiltoniano de interesse há um outro tipo de fase de singletos aleatórios, que pode ser diferenciada pelo expoente  $\psi$  (e, conseqüentemente, pelas respostas termodinâmicas que envolvem  $\psi$ ). Neste caso,  $\psi = \frac{1}{3}$ , como consequência de frações finitas de dizimações de primeira e segunda ordem em baixas energias. Para uma cadeia de spin  $S$  e todos os ângulos iniciais iguais, esta fase é encontrada em semi-eixos do espaço de parâmetros onde o multipletto fundamental tem mesmo valor de o spin original  $S$ , ou seja,  $\tilde{S} = S$ , e onde os acoplamentos vizinhos mudam de sinal sob dizimações de primeira ordem de teoria de perturbação. É necessário, adicionalmente, que o estado fundamental do problema de spins com acoplamentos efetivos de sinal contrário

ao sinal dos acoplamentos iniciais seja um singlete. Estas condições estão representadas esquematicamente na Fig. 5.3, e são suficientes para uma fase de singletos aleatórios de  $\psi = \frac{1}{3}$ . Assintoticamente, metade das dizimações são de primeira ordem e metade das dizimações são de segunda ordem, o que garante o expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ , conforme mostrado no Capítulo 2. Em resumo, este expoente é decorrência de somente as dizimações de segunda ordem abaixarem a escala de energia significativamente [21]. O estado fundamental é uma coleção de singletos agora formados majoritariamente por trios de spin e, mais raramente, por  $3k$  spins, sendo  $k$  um número natural maior que 1 (ver Fig. 3.8 para a representação do estado fundamental).

Note que a condição de gerar  $\tilde{S} = S$  só é possível quando os spins iniciais são inteiros. De fato, verificamos numericamente que, para spins inteiros com valor até  $S = 7$ , existe um semi-eixo no espaço de parâmetros em que os ingredientes listados acima estão presentes e onde, portanto, o expoente  $\psi$  é igual a  $\frac{1}{3}$ .

## 5.5 “Large Spin Phase”

Recapitulamos aqui os dois mecanismos distintos que podem levar o sistema a uma “Large Spin Phase” (LSP) (para detalhes, ver Capítulo 2).

- (i) Mistura de acoplamentos AF e FM;
- (ii) Distribuição de spins de desvio padrão finito.

Ambos mecanismos foram identificados no estudo da cadeia de Heisenberg feito em [26]. O primeiro mecanismo é o responsável, por exemplo, por uma LSP no eixo  $K^{(1)}$  com sinal de  $K_i^{(1)}$  aleatório, enquanto o segundo mecanismo leva a uma LSP mesmo no semi-eixo  $K^{(1)} > 0$  se a distribuição de spins tiver um desvio padrão não-nulo.

Vamos revisitar as regras de dizimação de primeira ordem, mostradas na Seção 5.2.1, mas agora sob a óptica de suas implicações físicas. A determinação de qual fase predomina assintoticamente (fora do octante AF, onde há total controle analítico) é uma questão a ser analisada, caso a caso, pela implementação numérica dos passos de dizimação, o que permite acompanhar a distribuição conjunta de acoplamentos e spins,  $P_\Omega(\mathbf{K}, S)$ . Uma característica marcante das regras de dizimação, em comparação com o caso da Ref. [26], é a possibilidade de renormalização para zero de acoplamentos vizinhos caso a ordem do tensor  $J$  seja maior que 1.

Há duas possibilidades de gerar acoplamentos nulos, conforme enumerado na Seção 5.2.1. Esta nulidade dos acoplamentos gerados pode inviabilizar a caracterização física de algumas regiões do espaço de parâmetro, mas, fortuitamente, estas regiões são de conteúdo nulo e requerem, portanto, ajuste fino dos parâmetros do Hamiltoniano. É importante notar, de antemão, que se acoplamentos de tensores de ordem 1 estão presentes (isto é, se  $K_1^{(J)} \neq 0$ ), então o controle sob o fluxo é total. Recordemos que

$$\tilde{K}_i^{(1)} = \frac{\tilde{S}(\tilde{S} + 1) + S_2(S_2 + 1) - S_3(S_3 + 1)}{2\tilde{S}(\tilde{S} + 1)} K_i^{(1)}, \quad (5.35)$$

onde  $i = 1, 3$ . Mas o multipletto fundamental neste eixo de  $J = 1$  pode ser somente  $\tilde{S} = |S_2 - S_3|$  ou  $\tilde{S} = S_2 + S_3$  (dependendo do sinal de  $K_i^{(1)}$ ) e, em ambos os casos,  $\tilde{K}_i^{(1)}$  será não-nulo. Concluimos, portanto, que a *única maneira* de obter acoplamentos efetivos nulos é em cadeias onde  $\tilde{K}_i^{(1)} \neq 0$ .

Os zeros do tipo (i) listado acima se proliferam no regime de spins efetivos  $\tilde{S}$  pequenos comparados à ordem dos acoplamentos tensoriais  $J$  e sua geração é esperada, portanto, nos primeiros passos de um fluxo para uma LSP, já que durante o fluxo o spin efetivo cresce rapidamente. Para os zeros oriundos da consideração (ii), não há uma regra equivalente: trata-se de um fenômeno que, até onde verificamos, não pode ser predito com uma regra geral, ocorrendo mesmo depois dos passos iniciais onde a regra (i) poderia vir a ocorrer.

## 5.6 Cadeia de spins $\frac{3}{2}$

Nesta Seção, analisamos em detalhes o limite de desordem forte da cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ . Começamos analisando as fases sobre um dos eixos. Já que os eixos são os pontos fixos estáveis, eles serão o destino da maioria dos fluxos e, portanto, merecem atenção especial. Concomitantemente, vamos analisar os semi-eixos onde o estado fundamental não é um singlete (ver Fig. 5.4 para um resumo dos resultados). Depois disso, vamos aos pontos fixos onde dois dos acoplamentos são não-nulos em baixas energias, mas a razão entre eles é constante. Finalmente, colecionando todos os pontos fixos encontrados, trabalhamos no diagrama de fases total sobre a superfície da esfera  $K^{(1)} \times K^{(2)} \times K^{(3)}$ .

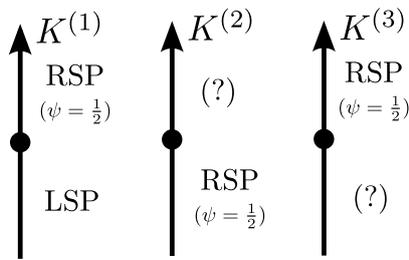


Figura 5.4: Fases sobre os eixos.

Eixo	Regra de dizimação
$K^{(1)} > 0$	$\tilde{K}_{1,4}^{(1)} = \frac{5}{2} \frac{K_1^{(1)} K_3^{(1)}}{K_2^{(1)}}$
$K^{(2)} < 0$	$\tilde{K}_{1,4}^{(2)} = \frac{1}{10} \frac{K_1^{(2)} K_3^{(2)}}{K_2^{(2)}}$
$K^{(3)} > 0$	$\tilde{K}_{1,4}^{(3)} = \frac{35}{128} \frac{K_1^{(3)} K_3^{(3)}}{K_2^{(3)}}$

Tabela 5.2: Regras de dizimação em um semi-eixo AF, onde pares de dois spins são congelados em estados de singletos.

### 5.6.1 Dizimação sobre um eixo

Começamos a análise nos focando nos pontos AF nos semi-eixos  $K^{(1)} > 0$ ,  $K^{(2)} < 0$  e  $K^{(3)} > 0$ . As regras de dizimação são do tipo  $\tilde{K}_{1,4}^{(J)} = \gamma^{(J)} \frac{K_1^{(J)} K_3^{(J)}}{K_2^{(J)}}$ , conforme listado na Tabela 5.2. No limite de desordem forte, o pré-fator é irrelevante e os três pontos fixos apresentam mesmo comportamento. O fluxo de acoplamentos é para uma fase de singletos aleatórios (de spin  $\frac{3}{2}$ ) de expoente  $\psi = \frac{1}{2}$ .

Apesar das regras da Tabela 5.2 serem justificadas somente no limite de desordem alta, a análise do fluxo do GR permite alguns comentários sobre o limite de desordem fraca. Nos eixos  $K^{(2)} < 0$  e  $K^{(3)} > 0$ , notamos que o pré-fator  $\gamma^{(J)}$  é tal que  $0 < \gamma^{(J)} < 1$ . Em analogia com o caso de spins  $\frac{1}{2}$  estudado por Fisher [2], inferimos que, nestes semi-eixos, o fluxo é para a distribuição de desordem infinita independentemente do desvio padrão da distribuição inicial. Ou seja, não há uma transição de fase entre fases onde a desordem é baixa e onde a desordem é alta. O mesmo não pode ser afirmado para o caso de Heisenberg  $K^{(1)} > 0$ , onde o pré-fator  $\gamma^{(1)}$  é maior que 1. Neste caso, para desordem baixa, os acoplamentos renormalizados podem ser maiores que os acoplamentos iniciais, o que leva a física de baixas energias a ser descrita por outros pontos fixos (e, conseqüentemente, outras fases)[25, 74, 75]. Não há consenso se o estado fundamental deste caso é uma fase de spins aleatórios de spin  $\frac{1}{2}$  construída sobre um sólido de valência de spin 1 [25] ou se o sistema limpo é robusto à introdução de desordem pequena [74, 75]. O fato que acoplamentos maiores *estabilizam* a fase AF de singletos aleatórios é um dos principais resultados encontrados neste estudo.

#### 5.6.1.1 Fluxo nos outros semi-eixos

Conforme mencionamos na Seção 5.2.1, a teoria de perturbação de primeira ordem prevê uma correção nula em alguns casos onde a ordem do tensor  $J$  é maior que um e o multipletto fundamental vale  $\tilde{S} > 0$ . Curiosamente, este é o caso para ambos os semi-eixos  $K^{(2)} > 0$  e  $K^{(3)} < 0$ , na cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ . Vamos descrever o processo natural para tentar corrigir este problema, o que permite obter um fluxo sem acoplamentos nulos por algumas escalas de energia a mais.

Se  $K^{(2)} > 0$ , o cálculo geral da teoria de perturbação de primeira ordem resulta em

$$\tilde{K}_1^{(2)} = \frac{3\tilde{x}^2 + \tilde{x}(2x_2 - 6x_3 - 3) + 3(x_2 - x_3 - 1)(x_2 - x_3)}{2\tilde{x}(4\tilde{x} - 3)} K_1^{(2)}, \quad (5.36)$$

onde  $x_i = S_i(S_i + 1)$  envolve os spins dizimados e  $\tilde{x} = \tilde{S}(\tilde{S} + 1)$  é dado pelo estado fundamental do problema de dois spins. Note que este resultado contempla o caso da cadeia de spin 1 descrita no Capítulo 3, pela substituição  $\tilde{x} = x_1 = x_2 = 2$  ( $S = 1$ ),  $\tilde{K}_1^{(2)} = -\frac{1}{2} K_1^{(2)}$ .

A renormalização de  $\tilde{K}_3^{(2)}$  segue analogamente, pela mudança  $x_2 \leftrightarrow x_3$ . No caso do spin  $\frac{3}{2}$ ,  $x_2 = x_3 = \frac{15}{4}$ . Note que a combinação de spins  $S_{1,4} = \frac{3}{2}$  e o multipletto fundamental  $\tilde{S} = 2$  é tal que a renormalização é nula, ou seja,  $\tilde{K}_1^{(2)} = \tilde{K}_3^{(2)} = 0$ . No Apêndice F, mostramos os detalhes de como calcular correções de segunda ordem de teoria de perturbação. Note que este caso não foi contemplado na Seção 5.2.1, onde nos restringimos ao

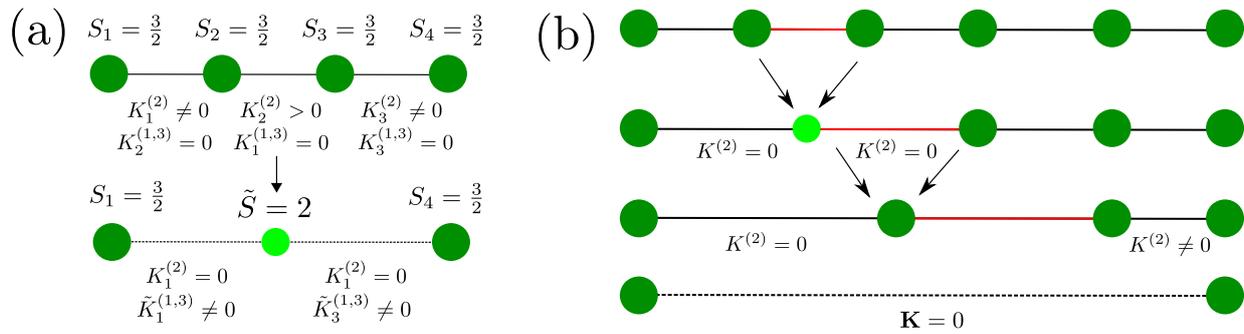


Figura 5.5: (a) Passo do GR quando spins são iguais a  $\frac{3}{2}$  e  $K^{(2)} > 0$ . O estado fundamental do problema de dois spins é  $\tilde{S} = 2$  e a primeira correção finita para acoplamentos vizinhos é de segunda ordem. Ao contrário do caso discutido na Seção 5.2.1, o passo de segunda ordem gera acoplamentos de tensores de ordem diferente daqueles presentes no Hamiltoniano original. (b) Representação esquemática de dizimações e da geração de acoplamentos nulos mesmo no caso em que a parte inicial do fluxo é controlada por dizimações de segunda ordem de multipletos com  $\tilde{S} \neq 0$ . O par mais fortemente acoplado é representado por uma linha vermelha. A primeira dizimação gera um spin efetivo  $\tilde{S} = 2$  (verde claro), que é acoplado aos seus vizinhos via  $\tilde{K}_i^{(1,3)} \neq 0$ , mas com  $K_i^{(2)} = 0$ . A segunda dizimação leva à geração de um spin  $\frac{3}{2}$ , com seu vizinho tendo  $K_i^{(2)} = 0$ . A terceira dizimação envolve a dizimação de singletos (segunda ordem de teoria de perturbação de singletos). Já que esta dizimação mantém a ordem dos tensores  $J$ , envolvendo o produto direto de  $\tilde{K}^{(J)}$  vizinhos, e o vizinho direito tem somente  $K^{(2)} \neq 0$  enquanto o vizinho esquerdo tem  $K^{(2)} = 0$ , um acoplamento efetivo nulo volta novamente aparecer.

cálculo de segunda ordem quando o estado fundamental era um singlete de dois spins. O resultado, quando termos não-frustrantes de três corpos e acoplamentos não-frustrantes são negligenciados é

$$\Delta H_{1,2}^{(2)} = \frac{(K_1^{(2)})^2}{K_2^{(2)}} \left( \frac{9}{16} \hat{O}_1 - \frac{3}{56} \hat{O}_3 \right). \quad (5.37)$$

onde  $\hat{O}_i = \hat{O}_i(\mathbf{S}_1 = \frac{3}{2}, \tilde{\mathbf{S}} = 2)$ . Por simetria, obtemos os acoplamentos que conectam ao sítio 4 pela substituição  $1 \leftrightarrow 4$ . Mesmo com esta correção extra ao fluxo, porém, acoplamentos nulos ainda podem ser gerados, em estágios posteriores. As regras de dizimação são representadas esquematicamente na Fig. 5.5(a). Esta prescrição é suficiente para determinar com acurácia as primeiras dizimações, mas acoplamentos zeros se proliferam em dizimações tardias. Até o ponto onde o fluxo não é dominado por estes zeros gerados, é tal que não há indicações de crescimento do spin, e portanto, nem de LSP. A caracterização total da fase envolve eliminar o problema de geração de zeros através de (pelo menos) terceira ordem de teoria de perturbação, ou através de alguma outra abordagem bastante diferente daquela feita neste trabalho.

Começando com valores negativos de  $K^{(3)}$ , o estado fundamental de dois spins fornece  $\tilde{S} = 1$ . Mas operadores de spin 1 não apresentam acoplamentos de tensores de terceira ordem (lembre-se que operadores de spin com  $2\tilde{S} < J$  não têm acoplamentos de ordem  $J$ ).

Note que no semi-eixo  $K^{(3)} < 0$  a renormalização que leva a zero é do tipo (i) discutido na Seção 5.2.1, enquanto no semi-eixo  $K^{(2)} > 0$ , é relacionado ao caso (ii) da Seção 5.2.1. No Apêndice F, mostramos, em detalhes, como calcular correções de segunda ordem para este caso. O Hamiltoniano que conecta um spin  $S_1 = \frac{3}{2}$  com um spin  $\tilde{S} = 1$  é, negligenciando interações de três corpos, a menos de uma constante aditiva,

$$\Delta H_{1,2}^{(2)} = \frac{(K_1^{(3)})^2}{|K_2^{(3)}|} \left( \frac{63}{20} \hat{O}_1 + \frac{189}{100} \hat{O}_2 \right). \quad (5.38)$$

Aqui,  $\hat{O}_i = \hat{O}_i(\mathbf{S}_1 = \frac{3}{2}, \tilde{\mathbf{S}} = 1)$ . Novamente, análogo ao caso de  $K^{(2)} > 0$ , esta prescrição é suficiente para solucionar o problema de zeros nos primeiros passos de dizimação. Não há, mais uma vez, indicações de geração de spins maiores na parte inicial do fluxo que conseguimos controlar.

### 5.6.2 Dizimações nos planos

Vamos explorar agora os planos onde dois dos acoplamento são inicializados com valores finitos. A estrutura do estado fundamental do problema de dois spins  $\tilde{S}$  é mostrada na Fig. 5.6. Na Tabela 5.3, listamos o conjunto de cores vinculados aos possíveis  $\tilde{S}$ . O mesmo código de cores será usado no estudo da cadeia de spins 2, mais à frente.

Estado fundamental	Cor
$\tilde{S} = 0$	azul
$\tilde{S} = 1$	vermelho
$\tilde{S} = 2$	verde
$\tilde{S} = 3$	laranja
$\tilde{S} = 4$	roxo

Tabela 5.3: Esquema de cores para a análise do estado fundamental do problema de dois spins nas cadeias de spins  $\frac{3}{2}$  e 2.

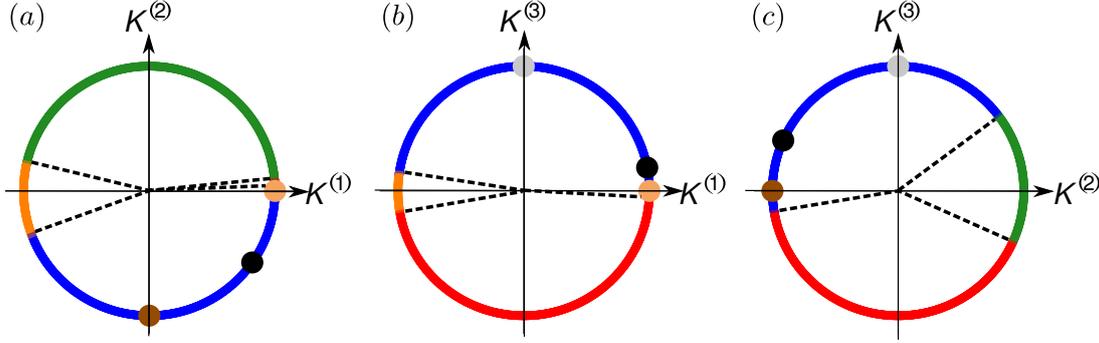


Figura 5.6: Diagrama que representa o estado fundamental do problema de dois spins  $\frac{3}{2}$  e os pontos fixos AF. O momento angular total  $\tilde{S}$  pode ser  $\tilde{S} = 0, 1, 2$  e 3. As diferentes cores representam os estados fundamentais do problema de dois spins (ver Tabela 5.3 para o esquema de cores). Os pontos fixos AF estáveis são aqueles localizados sobre os eixos, com  $K^{(1)} > 0$ ,  $K^{(2)} < 0$  e  $K^{(3)} > 0$ . Os pontos fixos localizados nos planos, mas fora dos eixos (pontos pretos), são instáveis com respeito à perturbações nos planos e também podem ser determinados analiticamente (ver o texto para mais detalhes). (a), (b) e (c) representam os planos  $K^{(3)} = 0$ ,  $K^{(2)} = 0$  e  $K^{(1)} = 0$ , respectivamente.

### 5.6.2.1 Fluxo no octante antiferromagnético (região azul)

Passamos agora para o caso em que duas constantes de acoplamento AF são não-nulas. Para tratar as dizimações nos planos, começamos listando explicitamente as regras mais gerais no caso AF. São elas:

$$\tilde{K}_{14}^{(1)} = 15 \frac{K_1^{(1)} K_3^{(1)}}{\left(6K_2^{(1)} - 90K_2^{(2)} + 441K_2^{(3)}\right)}, \quad (5.39)$$

$$\tilde{K}_{14}^{(2)} = -10 \frac{K_1^{(2)} K_3^{(2)}}{\left(4K_2^{(1)} - 40K_2^{(2)} + 49K_2^{(3)}\right)}, \quad (5.40)$$

$$\tilde{K}_{14}^{(3)} = \frac{35}{2} \frac{K_1^{(3)} K_3^{(3)}}{\left(8K_2^{(1)} - 20K_2^{(2)} + 63K_2^{(3)}\right)}. \quad (5.41)$$

Tomando a razão das equações acima, obtemos a separação da escala de energia das variáveis angulares. Definindo  $s^{(2)} = \frac{K^{(2)}}{K^{(1)}}$  e  $s^{(3)} = \frac{K^{(3)}}{K^{(1)}}$ , chegamos a

$$\tilde{s}_{1,4}^{(2)} = -\frac{2}{3} s_1^{(2)} s_3^{(2)} \left( \frac{6 - 90s_2^{(2)} + 441s_2^{(3)}}{4 - 40s_2^{(2)} + 49s_2^{(3)}} \right), \quad (5.42)$$

$$\tilde{s}_{1,4}^{(3)} = \frac{7}{6} s_1^{(3)} s_3^{(3)} \left( \frac{6 - 90s_2^{(2)} + 441s_2^{(3)}}{8 - 20s_2^{(2)} + 63s_2^{(3)}} \right). \quad (5.43)$$

Note que as equações acima devem ser complementadas com a equação de renormalização do  $K^{(1)}$

$$\tilde{K}_{14}^{(1)} = \frac{15}{\left(6 - 90s_2^{(2)} + 441s_2^{(3)}\right)} \frac{K_1^{(1)} K_3^{(1)}}{K_2^{(1)}}. \quad (5.44)$$

A condição de ponto fixo angular se torna  $\hat{s}_{1,4}^{(2)*} = s_1^{(2)*} = s_2^{(2)*} = s_3^{(2)*}$  e  $\hat{s}_{1,4}^{(3)*} = s_1^{(3)*} = s_2^{(3)*} = s_3^{(3)*}$ . Uma das maneiras de resolver este conjunto de equações é mantendo uma das variáveis, digamos  $s^{(2)}$ , iguais a zero, e resolver para as outras (neste caso, resta somente  $s^{(3)}$ ). Este é o mecanismo geral pelo qual os pontos fixos planares do spin  $\frac{3}{2}$  são encontrados.

No plano  $K^{(1)} \times K^{(3)}$ , a solução na região de singletos é  $s^{(3)*} = \frac{4}{21}$ . Mantendo  $K^{(3)} = 0$ , encontramos o ponto fixo  $s^{(2)*} = \frac{1}{30}(-9 - \sqrt{141}) \approx -0.70$ .

Podemos também procurar pontos fixos onde  $K^{(1)} = 0$ . Para tais, é conveniente introduzirmos as variáveis  $t^{(1)} = \frac{K^{(1)}}{K^{(2)}}$  e  $t^{(3)} = \frac{K^{(3)}}{K^{(2)}}$ . As regras são:

$$\tilde{t}_{1,4}^{(1)} = -\frac{3}{2} t_1^{(1)} t_3^{(1)} \frac{(4t_2^{(1)} + 49t_2^{(3)} - 40)}{(6t_2^{(1)} + 441t_2^{(3)} - 90)}, \quad (5.45)$$

$$\tilde{t}_{1,4}^{(3)} = -\frac{7}{4} t_1^{(3)} t_3^{(3)} \frac{(4t_2^{(1)} + 49t_2^{(3)} - 40)}{(8t_2^{(1)} + 63t_2^{(3)} - 20)}. \quad (5.46)$$

A solução com  $t^{(3)}$  finito e  $t^{(1)} = 0$  é  $t^{(3)*} = \frac{2}{49}(1 - \sqrt{141}) \approx -0.444$ .

Em suma, encontramos os três pontos fixos AF nos planos. Estes pontos são representados na Fig. 5.6. Conforme mostraremos, estes pontos são ingredientes fundamentais no estudo do diagrama de fases completo da cadeia de spin  $\frac{3}{2}$ . Do fato de que estes pontos são *estáveis* com respeito a perturbações fora dos planos, segue que deve haver pelo menos mais um ponto fixo, instável com respeito a qualquer perturbação SU(2). Conforme mostraremos mais tarde, trata-se do ponto com simetria SU(4).

Por hora, vamos continuar o estudo nos planos, analisando outras regiões, onde o estado fundamental do problema de dois spins não é um singlete.

### 5.6.2.2 Fluxo do GR em outras regiões nos planos

Passamos agora à análise do fluxo em outras regiões do plano, onde o estado fundamental não é um singlete. Assumimos que o ângulo inicial é fixo e que a desordem está na direção radial. Vamos assumir adicionalmente que começamos de um ponto em que dois acoplamentos são não-nulos, já que dizimações sobre os eixos foram contempladas anteriormente.

Começamos nos planos  $K^{(1)} \times K^{(2)}$  e  $K^{(1)} \times K^{(3)}$ . Na região laranja (Fig. 5.6), o fluxo gera spins  $\tilde{S} = S_i + S_{i+1}$  em todos os passos do fluxo e, conseqüentemente, a fase é ferromagnética com  $K^{(1)} < 0$  restando no limite de baixas energias. Começando o fluxo na região vermelha ( $\tilde{S} = 1$ ) ou verde ( $\tilde{S} = 2$ ), somente  $K^{(1)} \neq 0$ , já que  $K^{(2)}$  e  $K^{(3)}$  são renormalizados para zero. Depois de alguns passos iniciais, terminamos com uma coleção de spins  $\frac{3}{2}$  e spins  $\tilde{S}$ , sendo  $\tilde{S} = 1$  ( $\tilde{S} = 2$ ) na região vermelha (verde), acoplados por  $K^{(1)}$ . Seguindo o fluxo numericamente, encontramos que, após alguns passos iniciais, o fluxo leva a uma LSP.

No plano  $K^{(2)} \times K^{(3)}$ , o fluxo depende do ângulo inicial. O segundo quadrante do plano é puramente antiferromagnético, e foi analisado anteriormente. Na região verde do primeiro quadrante,  $K^{(2)}$  é renormalizado para zero e spins efetivos  $\tilde{S} = 2$  são gerados, acoplados por  $K^{(3)}$ , que passam a ter sinal negativo. Isto leva a outras possíveis regras de dizimação, representadas na Tabela 5.4. É interessante notar que estas regras são fechadas com relação ao fluxo do SDRG. Em baixas energias, a regra do tipo 4 da Tabela 5.4 sobrevive, e a fase é novamente uma fase de singletos aleatórios no semi-eixo  $K^{(3)} > 0$  e expoente igual a  $\frac{1}{2}$ . Note que esta fase AF depende fortemente do fechamento das regras de dizimação, já que spins  $\tilde{S} \neq \frac{3}{2}$  são gerados nos passos iniciais do SDRG.

Começando com ângulos na região vermelha do terceiro quadrante também gera-se spins diferentes daqueles presentes no início do fluxo (no caso,  $\tilde{S} = 1$ ). As regras de dizimação são bastante parecidas com as descritas no parágrafo anterior, com as mudanças  $K^{(2)} \rightleftharpoons -K^{(3)}$  e  $\tilde{S} = 1$ . Novamente, a física de baixas energias é descrita por uma fase de singletos aleatórios de expoente  $\psi = \frac{1}{2}$ , agora no semi-eixo  $K^{(2)} < 0$ .

No quarto quadrante, o fluxo não é totalmente controlado já que uma das constantes de acoplamento,  $K^{(2)}$  ou  $K^{(3)}$ , é automaticamente renormalizada para zero, dependendo se a região é a verde ou a vermelha (Fig. 5.6). A constante de acoplamento restante também se anula em estágios posteriores do fluxo. O que difere este caso dos anteriores é o fato de

(i) Não haver um conjunto finito de regras (spins e acoplamentos) fechados sob ação do SDRG (o que ocorre em outros quadrantes deste plano);

(ii) Não haver acoplamentos  $K^{(1)}$  presentes na cadeia.

Somente quando estas duas condições são concomitantemente satisfeitas é que existe a possibilidade de haver um fluxo onde acoplamentos nulos são gerados, e sobre o fluxo resultante não temos total controle, em baixas

Regra	$S_2$	$S_3$	Acoplamentos	$\tilde{S}$	Regras do GR
1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$K_2^{(2)}, K_2^{(3)} > 0$	2	$\tilde{K}_{\{1,3\}}^{(3)} = -\frac{1}{4}K_{\{1,3\}}^{(3)}$ e $\tilde{K}_{\{1,3\}}^{(2)} = 0$
2	2	$\frac{3}{2}$	$K_2^{(3)} < 0, K_2^{(2)} = 0$	$\frac{3}{2}$	$\tilde{K}_1^{(3)} = -\frac{8}{5}K_1^{(3)}$ e $\tilde{K}_3^{(3)} = \frac{1}{5}K_3^{(3)}$
3	2	2	$K_2^{(3)} > 0, K_2^{(2)} = 0$	0	Ordem 1; $\tilde{K}_{1,4}^{(3)} = \frac{4}{9} \frac{K_1^{(3)}K_3^{(3)}}{K_2^{(3)}}$
4	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$K_2^{(3)} > 0, K_2^{(2)} = 0$	0	Ordem 2; $\tilde{K}_{1,4}^{(3)} = \frac{5}{18} \frac{K_1^{(3)}K_3^{(3)}}{K_2^{(3)}}$

 Tabela 5.4: Regras de dizimação na região verde ( $\tilde{S} = 2$ ) do plano  $K^{(2)} \times K^{(3)}$  (Fig. 5.6).

energias. Note que alguns semi-eixos correspondem a casos em que isso ocorre. Repare também que uma pequena perturbação na direção  $K^{(1)}$  é suficiente para evitar acoplamentos nulos, e leva o sistema a uma LSP.

### 5.6.3 Linha SO(5) e pontos SU(4)

Delimitamos agora regiões no espaço de parâmetros do Hamiltoniano de spin  $\frac{3}{2}$  onde o grupo de simetria do Hamiltoniano é maior que SU(2). A discussão feita nesta Seção é baseada numa tradução da Ref. [68] para a linguagem de TEIs. Na Ref. [68], mostrou-se que o Hamiltoniano das cadeias de spins  $\frac{3}{2}$  possui uma simetria aumentada para SO(5) em uma região finita do espaço de parâmetros. Ainda mais interessante é o fato que esta região é aquela acessível a experimentos de átomos frios. Em tais experimentos, regras de seleção determinam que somente multipletos pares de dois spins estão presentes no Hamiltoniano efetivo, isto é,

$$H_{SO(5)} = \sum_{i=1}^{N_{sites}} \epsilon_i^{(0)} P_0(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) + \epsilon_i^{(2)} P_2(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}). \quad (5.47)$$

Nos restringindo a multipletos pares (ou seja,  $\epsilon_i^{(1)} = \epsilon_i^{(3)} = 0$ ), e descartando o termo constante  $K_i^{(0)}$ , encontramos as relações de transformação entre  $K$  e  $\epsilon$ :

$$K_i^{(1)} = -\frac{\pi}{15} (\epsilon_i^{(0)} + \epsilon_i^{(2)}), \quad (5.48)$$

$$K_i^{(2)} = \frac{\pi}{45} (\epsilon_i^{(0)} - 3\epsilon_i^{(2)}), \quad (5.49)$$

$$K_i^{(3)} = -\frac{4\pi}{315} (\epsilon_i^{(0)} + \epsilon_i^{(2)}). \quad (5.50)$$

Trabalhando na superfície da esfera de raio fixo  $r_i^2 = (K_i^{(1)})^2 + (K_i^{(2)})^2 + (K_i^{(3)})^2$ , achamos que os acoplamentos podem ser parametrizados convenientemente através de

$$K_i^{(1)} = -\frac{21r_i}{\sqrt{457}} \cos \theta_i, \quad (5.51)$$

$$K_i^{(2)} = r_i \sin \theta_i, \quad (5.52)$$

$$K_i^{(3)} = -\frac{4r_i}{\sqrt{457}} \cos \theta_i, \quad (5.53)$$

sendo  $0 \leq \theta_i < 2\pi$  e  $r_i > 0$ .

Quando  $r_i \cos \theta_i = \frac{\sqrt{457}}{21}$ ,  $r_i \sin \theta_i = \frac{1}{3}$ , o Hamiltoniano apresenta uma simetria ainda maior: SU(4), com a representação fundamental escrita em termos de spins em cada sítio [76, 68] (ver Apêndice B para uma introdução ao grupo SU(N)),

$$\mathcal{H}_{SU(4)a} = \sum_i R_i \left( \hat{O}_1 + \frac{1}{3} \hat{O}_2 + \frac{4}{21} \hat{O}_3 \right), \quad (5.54)$$

onde o acoplamento  $R_i$  é aleatório. Os operadores da equação acima são  $\hat{O}_J = \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$ . Note que este ponto do espaço de parâmetros tem um estado fundamental com degenerescência 6 (os multipletos de  $\tilde{S} = 0$  e  $\tilde{S} = 2$  são degenerados). As regras do SDRG e o fluxo neste ponto são explicados na Ref. [21], onde foi mostrado que o fluxo do SDRG gera todas as representações de SU(4) e que, em baixas energias, as frações

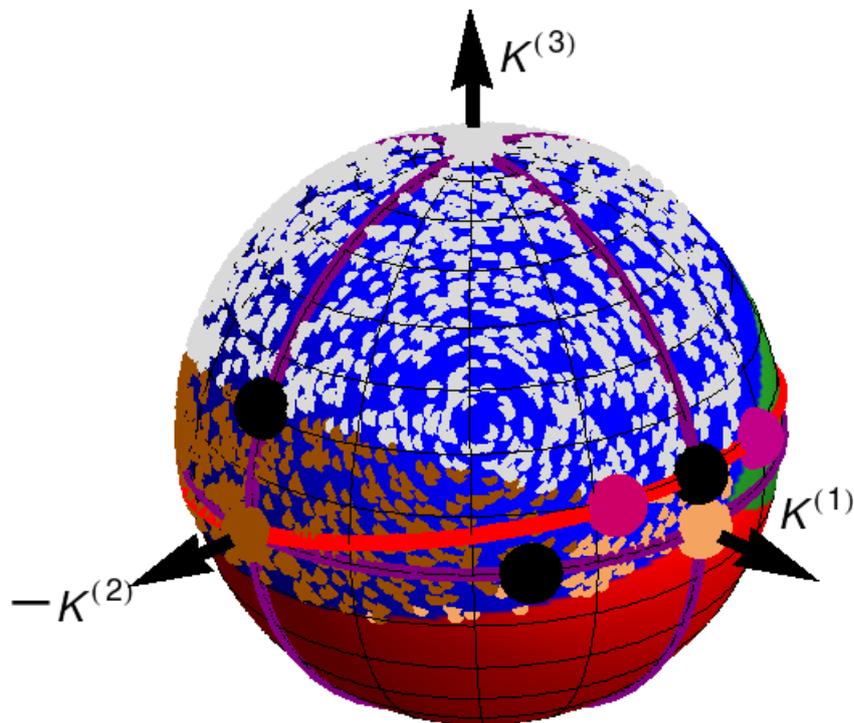


Figura 5.7: Diagrama de fases da cadeia desordenada de spins  $\frac{3}{2}$  com simetria  $SU(2)$ , cujas fases são representadas sobre esfera unitária. Os pontos sobre a região azul da esfera representam condições iniciais do fluxo numérico do SDRG, sendo o ângulo inicial fixo. Os pontos são coloridos de acordo com o ponto fixo para os quais eles fluem assintoticamente, e uma coleção de pontos de mesma cor delimita uma bacia de atração. Os pontos bege fluem para o ponto fixo  $K^{(1)} > 0$ , enquanto os pontos marrons fluem para o ponto fixo  $K^{(2)} < 0$ , e nos pontos brancos sobrevivem, em baixas energias, somente os acoplamentos  $K^{(3)} > 0$ . Também representada na região AF azul da esfera, em preto, os pontos fixos angulares planares, onde acoplamentos de uma determinada ordem são inicialmente zero e assim se mantêm durante todo o fluxo. Os dois pontos fixos com simetria  $SU(4)$  são representados em rosa. Um deles está na região AF, enquanto o outro se localiza na fronteira entre as regiões de singlete e quintuplete. A linha vermelha representa a curva onde o Hamiltoniano é invariante por transformações  $SO(5)$ , que obviamente contém o ponto  $SU(4)$ . O estado fundamental de todas as fases AF é composto de uma coleção de singletos idênticos aos singletos formados no ponto rosa, de simetria  $SU(4)$ , o que implica que toda a região azul é uma *fase de singletos aleatórios de  $SU(4)$* , com expoente  $\psi = \frac{1}{2}$ .

de cada representação são as mesmas. Foi mostrado que o estado fundamental é formado por uma coleção de singletos de  $SU(4)$ , com uma relação de energia-comprimento com expoente  $\psi$  igual a  $\frac{1}{4}$ .

Quando  $\epsilon_i^{(0)} = \epsilon_i^{(2)} = -\frac{15}{2\pi}R_i$ , ou equivalentemente,  $r_i \cos \theta_i = \frac{\sqrt{457}}{21}$ ,  $r_i \sin \theta_i = -\frac{1}{3}$ , temos outro ponto com simetria  $SU(4)$ :

$$H_{SU(4)b} = \sum_i \tilde{R}_i \left( \hat{O}_1 - \frac{1}{3} \hat{O}_2 + \frac{4}{21} \hat{O}_3 \right). \quad (5.55)$$

Neste caso, sítios alternados contêm representações fundamentais e anti-fundamentais do grupo, sucessivamente. O fluxo do SDRG consiste de dizimações de segunda ordem que formam singletos de  $SU(4)$  em todos os passos, o que leva a um expoente  $\psi = \frac{1}{2}$ , mas com *singletos invariantes pela simetria  $SU(4)$* . Obviamente, trata-se de um ponto fixo angular, já que o SDRG preserva simetrias do Hamiltoniano.

#### 5.6.4 Fluxo antiferromagnético sobre a superfície da esfera

Os três pontos fixos AF estáveis, mais os três pontos fixos nos planos, além do ponto fixo instável  $SU(4)$ , tornam o fluxo na região AF bastante rico. Para analisar em detalhes as bacias de atração, implementamos o fluxo do GR numericamente. A condição inicial é de ângulo fixo sobre a superfície da esfera, com a desordem na variável radial. A cadeia é inicializada com  $\sim 10^6$  spins e os raios são escolhidos de uma distribuição uniforme, com domínio entre 0 e 1. Para caracterizar o fluxo, analisamos as variáveis angulares,  $\langle \text{ang} K^{(i)} \rangle = \left\langle \frac{K^{(i)}}{r} \right\rangle$ , além de

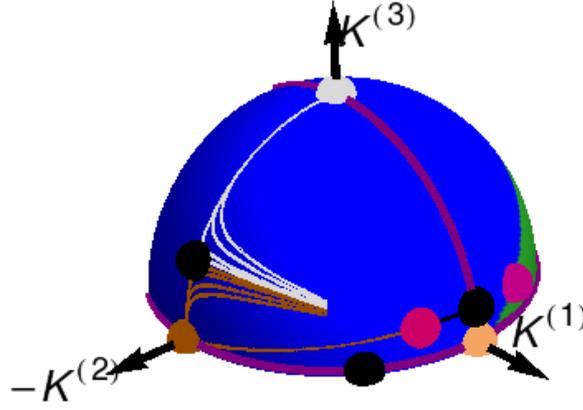


Figura 5.8: Região em que  $K^{(3)} > 0$  e o fluxo numérico do SDRG com diversas condições iniciais. Representados na Figura estão os *valores médios* das variáveis angulares durante o fluxo. Há uma coleção de condições iniciais perto da linha que separa as bacias de atração dos pontos fixos  $K^{(2)} < 0$  (marrom) e  $K^{(3)} > 0$  (branco). Durante uma grande fração do fluxo, o ponto fixo planar (preto) com  $K^{(1)} = 0$  domina o fluxo, porém, assintoticamente, o fluxo converge para um dos pontos fixos estáveis. Também representado na Figura está o fluxo começando próximo ao ponto com simetria  $SU(4)$  e  $K^{(2)} > 0$ , perturbado infinitesimalmente nas duas direções independentes onde a simetria  $SO(5)$  é preservada. O fluxo se mantém sobre a linha de simetria  $SO(5)$ , já que pontos fora desta linha têm simetria menor.

seu valor absoluto  $\langle \text{ang} |K^{(i)}| \rangle = \left\langle \frac{|K^{(i)}|}{r} \right\rangle$ . Os resultados líquidos estão representados na Fig. 5.7, onde pontos distintos representam diferentes condições iniciais, e cuja coloração é determinada pelos valores assintóticos das variáveis angulares.

Note que todas as fases AFs correspondem a coleções de singletos aleatórios, com  $\psi = \frac{1}{2}$ . Pela topologia do diagrama de fases, notamos que os singletos produzidos no ponto  $SU(4)$  são os mesmos que os produzidos nos outros pontos fixos, em particular nos pontos fixos estáveis (os semi-eixos AFs). Concluimos, portanto, que o estado fundamental de toda a fase AF é invariante por transformações  $SU(4)$ . Esta é uma generalização para cadeias de spin  $\frac{3}{2}$  e para o grupo  $SU(4)$  do chamado ponto fixo “mesônico” que encontramos na cadeia de spin 1, no Capítulo 3.

Outra característica interessante é que os pontos fixos correspondentes aos semi-eixos com tensores de ordem maior que 1 (pontos brancos e marrons no diagrama de fases) têm uma bacia de atração grande comparada com o ponto fixo de Heisenberg  $K^{(1)}$ , mostrado em bege. Também evidente da Fig. 5.7 é o fato que o ponto fixo  $K^{(1)} > 0$  é mais próximo à fronteira com outros multipletos. O fato de que tensores de ordem mais alta estabilizam a fase AF é um dos principais resultados deste trabalho.

A proximidade do ponto de Heisenberg da fronteira onde outros multipletos passam a ser o estado fundamental do problema de dois spins ( $\hat{S} \neq 0$ ) também explica o porquê da implementação do SDRG não ser necessariamente boa quando somente  $K^{(1)} \neq 0$ . Como o denominador de energia é pequeno, o pré-fator  $\gamma^{(1)} = \frac{5}{2}$  é maior que 1, o que pode comprometer a implementação do SDRG no regime de desordem inicial baixa [25, 74, 75].

Caracterizamos também o fluxo próximo à fronteira entre bacias de atração. Consideramos a fronteira entre os pontos fixos  $K^{(2)} < 0$  e  $K^{(3)} > 0$ . Começamos de uma coleção de linhas, representadas em branco e marrom na Fig. 5.7. As linhas marrons representam os fluxos que assintoticamente terminam no ponto fixo  $K^{(2)} < 0$ , enquanto as linhas brancas são aquelas em que o fluxo é na direção de  $K^{(3)} > 0$ . O caminho aos pontos fixos incluem excursões próximas aos pontos fixos planares, no caso, o ponto fixo do plano  $K^{(2)} \times K^{(3)}$ . A aproximação do ponto fixo planar é maior conforme a distância da condição inicial à linha crítica é menor. Começando exatamente sobre a linha crítica, o fluxo termina no ponto fixo planar.

A condição angular inicial também pode ser escolhida, em contrapartida, próxima à linha crítica  $SO(5)$ , que conecta os pontos fixos  $SU(4)$ , e inclui o ponto fixo sobre o plano  $K^{(2)} = 0$  e o ponto fixo  $K^{(2)} \neq 0$ . Esta linha é representada em preto e em marrom na Fig. 5.7. Os dois tipos de perturbação, que levam às curvas marrom ou preta, podem ser descritos a partir das Eqs. (5.51)-(5.53), com  $r = 1$  e  $\sin \theta_i = \frac{1}{3} \pm \epsilon$ ,  $\epsilon \ll 1$ .

Para outras regiões na esfera, fora da região azul, também seguimos o fluxo numericamente. De maneira geral (a menos de regiões de conteúdo nulo, como regiões nos planos, que foram discutidas anteriormente), o fluxo tende a uma “Large Spin Phase”, com somente  $K^{(1)} \neq 0$  em baixas energias, exceto na região laranja, onde o fluxo é completamente ferromagnético.

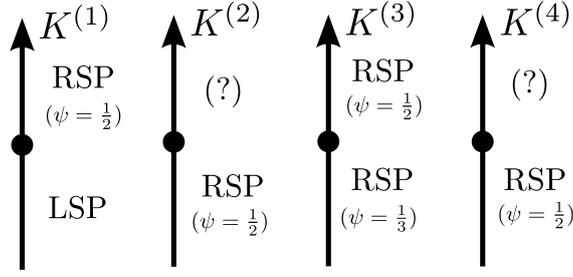


Figura 5.9: Fases da cadeia de spin 2 com simetria  $SU(2)$ , quando a conexão entre spins adjacentes se dá através de tensores de uma só ordem. Comparado ao caso do spin  $\frac{3}{2}$ , encontramos adicionalmente uma fase de singletos aleatórios com  $\psi = \frac{1}{3}$  quando  $K^{(3)} < 0$ . Além disso, no semi-eixo  $K^{(4)} < 0$ , a física é descrita por uma fase de singletos aleatórios com  $\psi = \frac{1}{2}$ , enquanto o semi-eixo  $K^{(4)}$  fornece acoplamentos efetivos nulos, o que torna impraticável determinar a física de baixas energias pelo método aqui proposto.

Plano	Ponto fixo planar
$K^{(1)} \times K^{(2)}$	$K^{(2)} = -\frac{4}{735} (39 + 4\sqrt{141}) K^{(1)}, K^{(1)} > 0$
$K^{(1)} \times K^{(3)}$	$K^{(3)} = \frac{1}{21} K^{(1)}, K^{(1)} > 0$
$K^{(1)} \times K^{(4)}$	$K^{(4)} = -\frac{2}{19845} (59 + \sqrt{18181}) K^{(1)}, K^{(1)} > 0$
$K^{(2)} \times K^{(3)}$	$K^{(3)} = \frac{1}{56} (1 - \sqrt{141}) K^{(2)}, K^{(2)} < 0$
$K^{(4)} \times K^{(2)}$	$K^{(4)} = \frac{1}{9} K^{(2)}, K^{(2)} < 0$
$K^{(4)} \times K^{(3)}$	$K^{(4)} = -\frac{1175 - \sqrt{2328145}}{1080} K^{(2)}, K^{(4)} < 0$

Tabela 5.5: Pontos fixos angulares da cadeia de spin 2 localizados em planos.

## 5.7 Cadeia de spins 2

Passamos agora ao estudo do diagrama de fases da cadeia de spins 2. O espaço de parâmetros é gerado por 4 eixos, correspondentes aos quatro acoplamentos linearmente independentes possíveis:  $K^{(1)}, K^{(2)}, K^{(3)}$  e  $K^{(4)}$ .

Vamos começar o estudo nos focando na região AF. Recapitulamos que, ao considerar o problema de 4 spins, a regra do SDRG consiste em congelar os spins  $S_2$  e  $S_3$ , supostos como sendo o par mais fortemente acoplado da cadeia, em um estado de singlete, e gerar acoplamentos efetivos  $K_{1,4}^{(J)}$  entre spins  $S_1$  e  $S_4$ , dados por

$$\tilde{K}_{1,4}^{(1)} = \frac{16K_1^{(1)}K_3^{(1)}}{4K_2^{(1)} - 21(5K_2^{(2)} - 56K_2^{(3)} + 270K_2^{(4)})}, \quad (5.56)$$

$$\tilde{K}_{1,4}^{(2)} = -\frac{28K_1^{(2)}K_3^{(2)}}{4K_2^{(1)} - 85K_2^{(2)} + 616K_2^{(3)} - 810K_2^{(4)}}, \quad (5.57)$$

$$\tilde{K}_{1,4}^{(3)} = \frac{112K_1^{(3)}K_3^{(3)}}{8K_2^{(1)} - 110K_2^{(2)} + 252K_2^{(3)} - 1215K_2^{(4)}}, \quad (5.58)$$

$$\tilde{K}_{1,4}^{(4)} = -\frac{378K_1^{(4)}K_3^{(4)}}{5(8K_2^{(1)} - 30K_2^{(2)} + 252K_2^{(3)} - 675K_2^{(4)})}. \quad (5.59)$$

Para acoplamentos em um determinado eixo, as fases encontradas estão representadas na Fig. 5.9. Lembre-se que a fase AF tem como pontos fixos estáveis os semi-eixos  $(-1)^{J+1} K^{(J)}$ , o que neste caso fornece  $K^{(1)} > 0$ ,  $K^{(2)} < 0$ ,  $K^{(3)} > 0$  e  $K^{(4)} < 0$ .

Os pontos fixos planares podem ser encontrados pelo mesmo método delimitado na cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ , através de variáveis angulares, dadas por razões de pares de acoplamentos. As soluções encontradas estão listadas na Tabela 5.5 e representadas pelos pontos pretos na Fig. 5.10.

Usando a notação  $s^{(i)} = \frac{K^{(i)}}{K^{(1)}}$ ,  $i = 2, 3, 4$ , os pontos fixos na superfície da esfera  $K^{(1)} \times K^{(2)} \times K^{(3)}$  na região do singlete são

$$\tilde{s}^{(2)*} = -\frac{4}{1617} (55 + 2\sqrt{1969}), \quad (5.60)$$

$$\tilde{s}^{(3)*} = \frac{1}{6468} (253 + 5\sqrt{1969}). \quad (5.61)$$

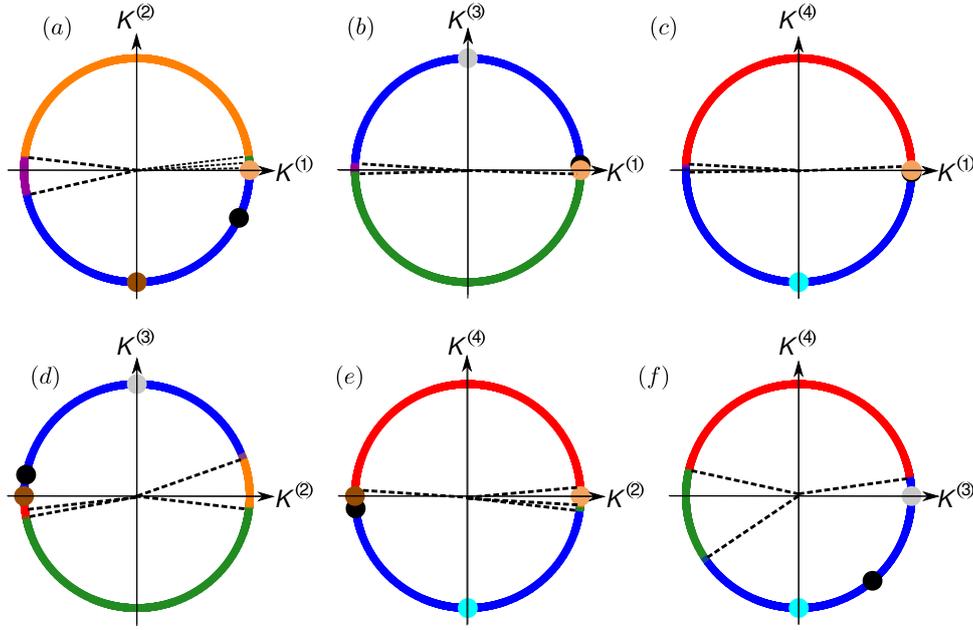


Figura 5.10: Pontos fixos AF e estados fundamentais de problemas de dois spins. Diferentes cores representam os diferentes estados fundamentais possíveis para dois spins. A equivalência entre as cores e os estados fundamentais está mostrada na Tabela 5.3.

Voltando a análise sobre os eixos, podemos analisar a diferença entre as duas fases encontradas sobre o eixo  $K^{(3)}$ . No caso de  $K^{(3)} > 0$ , as regras de dizimação de segunda ordem em todos os passos do SDRG levam ao expoente  $\psi = \frac{1}{2}$ . O semi-eixo  $K^{(3)} < 0$ , por outro lado, envolve dizimações de primeira ordem que geram spins efetivos  $\tilde{S} = 2$ , ao mesmo tempo que os acoplamentos vizinhos mudam de sinal. Trata-se de um caso englobado naquele descrito de maneira geral na Fig. 5.3, que leva a um expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ . Esta duas diferentes fases AFs podem ser verificadas através de simulação numérica. Começamos com cadeias de  $8 \times 10^6$  e implementamos o processo de dizimação numericamente. Na Fig. 5.11, graficamos  $\log L \times \log \Gamma$  (lembre-se que  $\Gamma = -\log \Omega$  e  $L$  é o espaçamento médio entre spins não-dizimados). No regime assintótico (valores altos de  $\Gamma$  e  $L$ ), a curva pode ser ajustada por uma reta  $\log_{10} L = \psi \log_{10} \Gamma + B$ , de onde  $\psi$  pode ser extraído. Para todos os valores iniciais  $K^{(3)} > 0$ , encontramos  $\psi = 0.54$ , enquanto para  $K^{(3)} < 0$  achamos  $\psi = 0.38$ . Conforme mostrado na Ref. [21], a introdução de qualquer fração finita de acoplamentos que geram dizimações de primeira ordem (no caso, fração finita de  $K^{(3)} < 0$ ) leva a desestabilização da fase de  $\psi = \frac{1}{2}$  e, assintoticamente, o fluxo consistirá de metade de dizimações de primeira e metade de dizimações de segunda ordem, ou seja,  $\psi$  passa a ser  $\frac{1}{3}$ .

Em analogia com a cadeia de spin 1 estudada no Capítulo 3, um expoente  $\psi$  igual a  $\frac{1}{3}$  sugere a possibilidade de emergência de simetria “bariônica”  $SU(3)$ . Vamos mostrar, na sequência, que a simetria da fase de baixas energias *se mantém*  $SU(2)$ , ao contrário do que ocorre na cadeia de spins 1. Para tanto, construímos os singletos

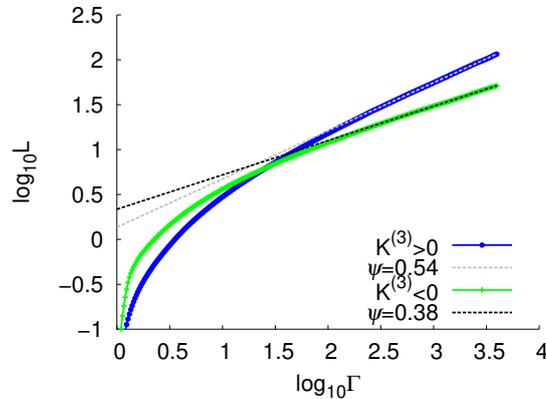


Figura 5.11: Relação entre energia e comprimento no eixo  $K^{(3)}$ , começando com todos os spins iguais a 2. Para valores iniciais negativos, o expoente  $\psi$  é igual a 0.38, próximo ao valor esperado  $\psi = 0.33$ , enquanto começar a cadeia somente com  $K^{(3)} > 0$  gera  $\psi = 0.54$ , próximo ao valor esperado  $\psi = 0.5$ .

de três spins  $S = 2$  que são formados em tal fase e calculamos as funções de correlação dos 24 geradores de  $SU(5)$ ,  $\Lambda_i^{(a)}$ , com  $a = 1, \dots, 24$  e  $i = 1, 2, 3$ . Mantemos a normalização de geradores de  $SU(5)$  dada por  $\text{Tr}(\Lambda^{(a)}\Lambda^{(b)}) = 2\delta^{a,b}$ . A ideia é que, se presente, a estrutura  $SU(3)$  aparece na degenerescência da função de correlação. O cálculo explícito fornece

$$\left| \langle \Lambda_1^{(a)} \Lambda_2^{(a)} \rangle \right| = \begin{cases} \frac{1}{5} & a = 1, 2, 3 \\ \frac{3}{35} & a = 4, \dots, 8 \\ \frac{8}{35} & a = 10, \dots, 15 \\ \frac{4}{35} & a = 16, \dots, 24 \end{cases} \quad (5.62)$$

Note que os resultados encontrados aparecem exatamente com as degenerescências esperadas para multipletos de  $SU(2)$ . Isto implica que, mesmo com  $\psi = \frac{1}{3}$ , *não há aumento de simetria em baixas energias*. Munidos de tal resultado, podemos fazer uma diferenciação rigorosa entre aumento de simetria e fases de singletos aleatórios com  $\psi = \frac{1}{n}$ ,  $n > 2$ . Os únicos ingredientes necessários para expoentes menores que  $\frac{1}{2}$  são frações finitas de dizimações de primeira ordem no ponto fixo e manutenção dos valores de  $\tilde{S} = S$ . De fato, conforme mostrado na Ref. [21], se assintoticamente, por um mecanismo qualquer, uma fração  $p$  das dizimações for de primeira ordem, e  $1 - p$  for de segunda ordem, o expoente  $\psi$  será dado por

$$\psi = \frac{1-p}{2-p} \leq \frac{1}{2}. \quad (5.63)$$

e a relação energia-comprimento será  $\Gamma \sim L^\psi$ . Segue também da equação de fluxo do SDRG que as correlações spin-spin decaem como  $\phi = 4\psi$  [21, 2].

A emergência de simetria é mais restritiva. Os ingrediente acima são necessários, mas não são suficientes. Além de mudanças nos expoentes  $\psi$ , os pré-fatores necessitam ter a estrutura do grupo emergente. No caso de singletos de dois spins, em qualquer parte do diagrama de fases AF, singletos de dois spins têm um valor esperado de  $\Lambda_1^{(a)}\Lambda_2^{(a)}$  dado por

$$\left| \langle \Lambda_1^{(a)} \Lambda_2^{(a)} \rangle \right| = \frac{2}{5}, \quad a = 1, \dots, 24. \quad (5.64)$$

que é exatamente o predito pela estrutura  $SU(5)$ . Ou seja, toda a região azul do diagrama de fases da Fig. 5.12 é formada, em baixas energias, por uma coleção de singletos invariantes por  $SU(5)$ . Esta é a generalização do ponto fixo “mesônico” descrito no Capítulo 3, onde os singletos eram singletos de  $SU(3)$ , para cadeias de spin 2 e o grupo  $SU(5)$ . O Hamiltoniano no ponto fixo  $SU(5)$  é dado por

$$\mathcal{H}_{SU(5)b} = \sum_i R_i \left( \hat{O}_1 - \frac{4}{21} \hat{O}_2 + \frac{1}{21} \hat{O}_3 - \frac{4}{189} \hat{O}_4 \right). \quad (5.65)$$

Note que, apesar de instável em todas as direções, tal ponto é de fundamental relevância, já que a simetria  $SU(5)$  deste ponto é herdada por todos os outros pontos fixos na região AF azul.

Para o caso em que tensores de três ordens são inicialmente não-nulos, nos focaremos na região tridimensional gerada pelos eixos  $K^{(1)}$ ,  $K^{(2)}$  e  $K^{(3)}$ . A introdução do quarto acoplamento  $K^{(4)}$  não gera novas fases além dessas que estamos analisando. O estudo do diagrama de fases é feito de maneira similar àquele feito na cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ . Representamos, novamente, os pontos em uma esfera, na Fig. 5.12. O esquema de cores usado é o mesmo daquele usado para a cadeia de spins  $\frac{3}{2}$  (ver a Tabela 5.2).

## 5.8 Conclusões

Neste Capítulo, analisamos o limite de desordem forte de cadeias de spin  $S$  simétricas por transformações  $SU(2)$  quando interações além das interações de Heisenberg estão presentes. A adição destas novas interações leva naturalmente à linguagem de TEIs. Os novos pontos fixos estáveis AF correspondem aos casos onde somente TEIs de uma determinada ordem acoplam spins em sítios diferentes. Além dos pontos fixos estáveis, existem vários outros pontos fixos (é simples mostrar que o número *total* de pontos fixos AF na “região azul”, para uma cadeia de spins  $S$ , é  $2^{2S} - 1$ ). O mais interessante deles, para cadeias de spin  $S$ , é o ponto com simetria  $SU(2S + 1)$ . Apesar deste ponto requerer ajuste fino dos parâmetros do Hamiltoniano para ser sintonizado, a simetria  $SU(2S + 1)$  está presente *em todas as fases AF* onde somente singletos de dois spins são formados.

Além disso, é notório de nosso estudo que o esquema de SDRG desenvolvido aqui se torna mais preciso conforme maior for a ordem dos tensores presentes. A razão por trás disso é que os pré-fatores das regras de dizimação diminuem, em decorrência do aumento dos denominadores de energia. Conjecturamos, a partir disso, que a física de desordem baixa, quando tensores de ordens maiores são introduzidos, é similar a de desordem

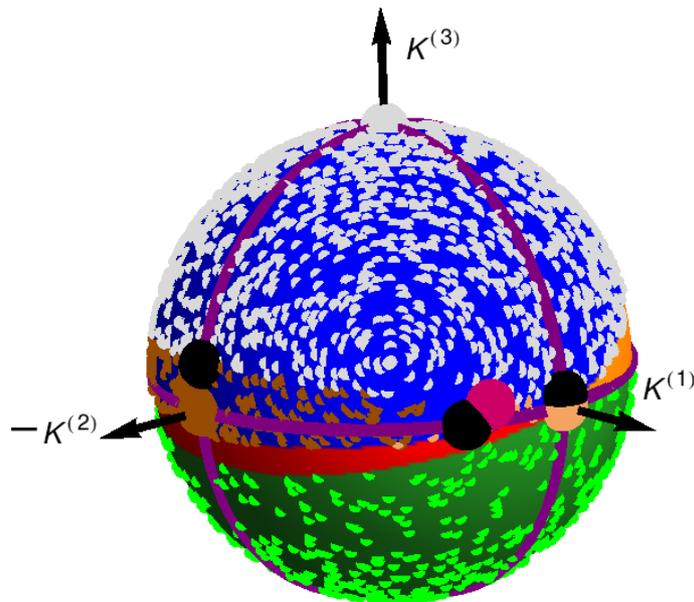


Figura 5.12: Diagrama de fases da cadeia de spin 2 invariante por transformações  $SU(2)$  com acoplamentos desordenados, representados na esfera  $K^{(1)} \times K^{(2)} \times K^{(3)}$ . As regiões na esfera são coloridas de acordo com o estado fundamental do problema de dois spins (ver Tabela 5.3 para o esquema de cores). Os diferentes pontos na esfera representam diferentes condições iniciais do fluxo numérico do SDRG, sendo mantido constante o ângulo inicial. Mantemos sempre  $K^{(4)} = 0$ , já que a introdução de  $K^{(4)}$  finito não leva a novas fases. Um fluxo genérico na região azul leva a um dos pontos fixos estáveis,  $K^{(1)} > 0$ ,  $K^{(2)} < 0$ ,  $K^{(3)} > 0$  (ou  $K^{(4)} < 0$ , se  $K^{(4)}$  for incluído). Também na região azul estão os pontos fixos planares, representados por pontos pretos, além do ponto fixo instável com respeito a perturbações nas três direções (mas estável com respeito a  $K^{(4)}$ ), representado em rosa. O fluxo numérico na região verde é na direção de um ponto fixo com somente acoplamentos  $K^{(3)}$ , sendo a média de  $K^{(3)}$  nula. Os pontos verdes-claros representam diferentes condições iniciais nesta fase de singletos aleatórios de expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ . Mesmo com o expoente  $\psi = \frac{1}{3}$ , esta fase não apresenta simetria emergente  $SU(3)$  em baixas energias (ver texto para mais detalhes).

alta, o que elimina a possibilidade de transição entre uma fase de desordem baixa e uma fase de desordem alta, como aquela descrita nas Refs. [57, 58] para cadeias de spin 1 com acoplamento de Heisenberg.

Fomos capazes de fazer ainda uma diferenciação clara entre simetria emergente e fases de singletos aleatórios com expoentes  $\psi < \frac{1}{2}$ . Discutimos como  $\psi < \frac{1}{2}$  é uma condição necessária, mas não suficiente, para emergência de simetria em baixas energias (em analogia à fase “bariônica” discutida para spin 1 no Capítulo 3). Ficou evidente também que, nestas cadeias de spin  $SU(2)$ , obter fases com  $\psi < \frac{1}{3}$  não é uma tarefa trivial. Obter expoentes iguais a  $\frac{1}{3}$  (sem simetria emergente, contudo) em cadeias de spins inteiros é uma tarefa relativamente simples, cujos ingredientes necessários são satisfeitos em porções do diagrama de fases para todos os spins inteiros até pelo menos  $S = 7$ .

Algumas questões interessantes ficam para trabalhos futuros. Uma delas é o fluxo nos casos onde a primeira ordem de teoria de perturbação fornece constantes renormalizadas para zero. Este é o caso em um subconjunto de medida zero no espaço de fase  $J_{\max}$ -dimensional, isto é, em conjuntos contidos necessariamente no hiperplano  $K_i^{(1)} = 0$ . Já que a renormalização de  $K_i^{(1)}$  nunca é zero, estes acoplamentos sobrevivem e acabam por dominar o fluxo em baixas energias. Em particular, seria interessante desvendar se os pontos fixos onde as regras de SDRG que propomos falham apresentam estrutura familiar ou uma física totalmente nova.

Também é interessante a questão de subregiões de simetria aumentada contidas no diagrama de fases. Um exemplo é a linha  $SO(5)$  das cadeias de spin  $\frac{3}{2}$  [67, 68]. Claramente, estas serão caracterizadas por um fluxo que é confinado a um espaço de dimensão menor que o espaço de fase total, já que o grupo de renormalização preserva a simetria, por construção. Note que um Hamiltoniano genérico tem suporte de dimensão maximal. Claramente, as Eqs. (5.31) para as variáveis angulares contêm toda a informação que é necessária para encontrar essas “hiper-linhas invariantes”. Note que a escala de energia Eq. (5.30) é completamente irrelevante para esta análise. De fato, encontramos a linha  $SO(5)$  a partir de uma análise que levou em conta somente variáveis angulares. Deixamos para um estudo futuro a tarefa de encontrar um procedimento sistemático que permite encontrar outras linhas invariantes neste caso genérico.

Finalmente, fica também a pergunta sobre a possibilidade de fases de  $\psi < \frac{1}{2}$ , além do caso  $\psi = \frac{1}{3}$  que encontramos. Estas fases existem em outros sistemas, como pontos multicríticos de cadeias de spin  $S$  [20],

em cadeias de spins  $SU(N)$  [21], e em cadeias aniônicas do tipo  $SU(2)_k$  [22]. Estas requerem ajuste fino de parâmetros e/ou simetrias exóticas, o que não é o caso em nossa fase de singletos aleatórios de  $\psi = \frac{1}{3}$ , o que a torna, em certo sentido, única. É difícil imaginar, contudo, que este seja o único exemplo. Esta questão também fica em aberto, para estudos futuros.

# Capítulo 6

## Equações de Fluxo

Introduziremos, neste Capítulo, o método de Equações de Fluxo (EF). Este método será usado no Capítulo 7.

Dividimos este Capítulo em três partes. Na Seção 6.1, introduzimos e contextualizamos o uso de Equações de Fluxo. Na Seção 6.2, exemplificamos o uso com um exemplo simples: uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  na presença de campo magnético. Por fim, destacamos conclusões vindas das Seções anteriores.

### 6.1 Introdução às Equações de Fluxo

Nesta Seção, introduzimos as EFs, seguindo o trabalho pioneiro de Wegner [77] em 1993-1994 e, concomitantemente, Glasek e Wilson, no contexto de altas energias [78, 79]. Desde seu nascimento, este método foi usado no tratamento dos mais diversos problemas, desde sistemas quânticos dissipativos até sistemas fortemente correlacionados (ver a Ref. [80] e as referências lá incluídas).

A ideia básica é começar com um Hamiltoniano que não seja diagonal e, através de transformações unitárias infinitesimais, tornar o Hamiltoniano “mais e mais diagonal” em energia. Explicaremos a seguir em detalhes o que esta afirmação significa. De maneira geral, conceitualmente, o método de EFs lembram o SDRG, mas com a diferença conceitual importante que as EFs retêm *todos* os graus de liberdade, ao contrário do SDRG, que se foca no setor de baixas energias. O fato de que todos os graus de liberdade são mantidos é útil, por exemplo, em sistemas fora do equilíbrio, como é o caso em sistemas de muitos corpos localizados [81].

Na Fig. 6.1, esquematizados o processo de fluxo, sendo o Hamiltoniano, Eq. (6.1), representado matricialmente. Suponha que o Hamiltoniano seja de um sistema de muitos corpos, com os elementos da diagonal ordenados, em ordem crescente em energia, desde  $E = 0$  até um “cutoff”  $E = \Gamma$ . Os elementos fora da diagonal são acoplamentos entre modos de energia diferentes sendo que, quanto mais distante da diagonal, maior a transferência de energia. Usualmente, em métodos de grupo de renormalização (incluindo o SDRG), são eliminados modos de energia entre  $\Gamma$  e  $\Gamma - d\Gamma$ . Em sistemas sem desordem, este procedimento é feito, por exemplo, através de integrais de caminho. Sob a óptica das EFs, serão eliminados primeiro os modos que transferem mais energia. No caso do SDRG, usamos  $\Gamma$  como sendo o maior gap local (em escala logarítmica). No método de EFs, Fig. 6.1b, o objetivo é manter todos os graus de liberdade, reduzindo  $\Gamma_{off}$  hierarquicamente. Nos primeiros passos, serão resolvidos os modos com grandes diferenças de energia, enquanto modos quasi-degenerados serão tratados ao final.

O primeiro passo no tratamento de problemas com EFs consiste em decompor o Hamiltoniano em duas partes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}, \quad (6.1)$$

sendo  $[\mathcal{H}_0, \mathcal{V}] \neq 0$ . Tipicamente, escolhe-se  $\mathcal{H}_0$  como sendo a parte diagonal do Hamiltoniano ou cuja diagonalização é simples, e  $\mathcal{V}$  a parte fora da diagonal e, em casos interagentes, sendo também aquela que contém os termos de mais de dois corpos. As transformações unitárias utilizadas para diagonalizar o Hamiltoniano são geradas pelo gerador canônico *anti-hermitiano* [77]

$$\eta = [\mathcal{H}_0, \mathcal{V}]. \quad (6.2)$$

Chamamos de  $B$  a variável de fluxo (análoga ao tempo, na versão de Heisenberg da Mecânica Quântica). A família de Hamiltonianos gerada durante o processo de atuação das transformações unitárias será chamada de  $\mathcal{H}(B)$ , sendo o Hamiltoniano de início  $\mathcal{H}(\Gamma = 0) = \mathcal{H}$ .

Enfatizamos que o método de EFs é usado para diagonalizar sistemas mas que, adicionalmente e mais fundamentalmente, proverá uma expansão sistemática em termos de um parâmetro não-perturbativo.

A equação de movimento para o Hamiltoniano é

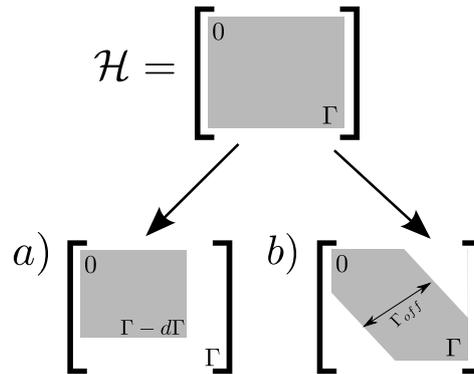


Figura 6.1: Comparação esquemática entre o método de SDRG que utilizamos nos Capítulos anteriores, e o método de EFs, que introduzimos neste Capítulo. Assuma que os elementos da diagonal estão ordenados, em ordem crescente em energia, com valor máximo igual a  $\Gamma$ . (a) No método de SDRG, os graus de liberdade mais altos são removidos de maneira hierárquica, ditada pelo maior gap local (ver Capítulo 2). (b) Nas EFs, a hierarquia envolve remover primeiro grau de liberdade que transferem mais energia. Ao contrário do SDRG, que mantém intacta a física de baixas energias, com as EFs o espaço de Hilbert todo é mantido.

$$\frac{d\mathcal{H}}{dB} = [\eta, \mathcal{H}]. \quad (6.3)$$

Note que é simples achar uma solução formal para a equação acima, dada por

$$\mathcal{H}(B) = U(B) \mathcal{H}(B=0) U^\dagger(B) \quad (6.4)$$

onde  $U(B) = T_B \exp\left(\int^\Gamma d\tilde{B} \eta(\tilde{B})\right)$ , com  $T_B$  representando o “ordenamento temporal” (no caso, ordenamento de  $B$ ). Apesar de formalmente simples, a equação acima envolve o cálculo de exponencial de operadores, o que torna esta equação computacionalmente pouco atraente. De maneira geral, o gerador  $\eta(B)$  não comuta em momentos diferentes do fluxo. Usaremos majoritariamente a Eq. (6.3) estudar o fluxo. Dimensionalmente, o gerador, por ser o comutador de duas partes do Hamiltoniano, tem dimensão de energia ao quadrado. O parâmetro  $B$  terá, então, dimensão de  $(\text{Energia})^{-2}$ , o que garante que o produto de ambos seja adimensional. Dimensionalmente, então, podemos fazer a identificação seguinte entre  $\Gamma_{off}$  e  $B$ :

$$\Gamma_{off} \sim \frac{1}{\sqrt{B}}. \quad (6.5)$$

Note que, ao mesmo tempo que este conjunto de transformações unitárias mantém a simetria do Hamiltoniano, todos os termos que não quebram a simetria podem ser (e, de maneira geral, serão) gerados durante o fluxo. Note que um possível desafio na implementação das EFs consiste na geração de termos de interação extras durante o fluxo. De maneira concreta, assumamos que a interação inicial seja de termos de dois corpos, o que corresponde a dois operadores de criação e dois operadores de destruição de bósons ou férmions multiplicados (em linguagem de segunda quantização). O comutador destes termos produzirá termos com três operadores de criação e três de destruição. Uma maneira de truncar o número de operadores nos termos deve, então, ser desenvolvida, dependendo da física do problema tratado.

Assim como tradicionalmente ocorre em procedimentos de grupo de renormalização, a simetria do Hamiltoniano é preservada, se uma suposição adicional for feita. Suponha que a simetria seja realizada pelo operador  $S$  e que

$$[H_0(B=0), S] = 0. \quad (6.6)$$

Como  $[H(B=0), S] = 0$ , então  $S$  comuta com o gerador  $\eta$  e a simetria se preservará durante o fluxo. Na maioria dos problemas físicos, a Eq. (6.6) é satisfeita. Deve ser tomado cuidado se for necessário usar um esquema para truncar a evolução das EFs, para garantir que a simetria continue sendo preservada.

A evolução em  $\Gamma$  de um operador  $O$  segue, usando o mesmo gerador  $\eta$ , através da equação seguinte

$$\frac{dO}{dB} = [\eta, O]. \quad (6.7)$$

Não é óbvio, do conjunto de transformações unitárias, que, no limite  $B \rightarrow \infty$ , o Hamiltoniano será diagonal. Vamos mostrar explicitamente que este é realmente o caso. Para tanto, calculemos  $\frac{d}{dB} \mathcal{V}^2(\Gamma)$ , que representa o modo como a soma dos quadrados dos elementos de  $\mathcal{V}$  fluem. Uma condição necessária e suficiente para o

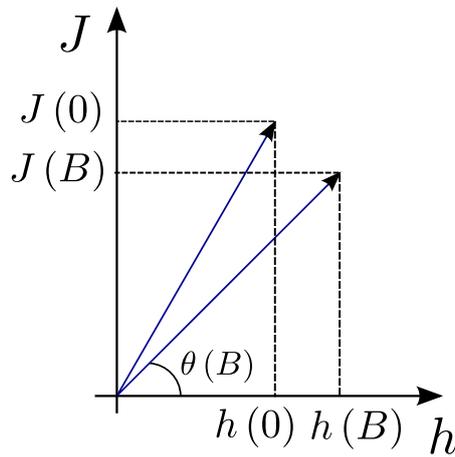


Figura 6.2: Representação esquemática da evolução do vetor  $(h(B), J(B))$  que representa os acoplamentos da Eq. (6.8) durante o fluxo. As equações de fluxo equivalem a rotações infinitesimais sucessivas que tornam o Hamiltoniano diagonal ou, equivalentemente,  $\theta(B \rightarrow \infty) = 0$ , mantendo a norma  $\sqrt{J^2 + h^2}$  constante.

Hamiltoniano final ser diagonal é que  $\mathcal{V}^2(B \rightarrow \infty) = 0$ . Usando a hipótese que  $\text{Tr}(\mathcal{V} \frac{d\mathcal{H}_0}{dB}) = 0$  e fazendo o cálculo explicitamente, encontramos

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dB} \mathcal{V}^2(B) &= 2\text{Tr} \left( \mathcal{V} \frac{d\mathcal{V}}{dB} \right) \\
 &= 2\text{Tr} \left( \mathcal{V} \frac{d\mathcal{V}}{dB} + \mathcal{V} \frac{d\mathcal{H}_0}{dB} \right) \\
 &= 2\text{Tr} \left( \mathcal{V} \frac{d\mathcal{H}}{dB} \right) \\
 &= 2\text{Tr}(\mathcal{V}[\eta, \mathcal{H}]) \\
 &= 2\text{Tr}(\eta\eta) \\
 &= -2\text{Tr}(\eta^\dagger\eta) \leq 0,
 \end{aligned}$$

onde usamos que  $\eta^\dagger\eta$  é um operador positivo-definido e  $\eta^\dagger = -\eta$ , da definição de  $\eta$ . A hipótese de que  $\text{Tr}(\mathcal{V} \frac{d\mathcal{H}_0}{dB}) = 0$  deve ser verificada caso a caso, dependendo do problema tratado. Como a soma dos módulos quadrados de  $\mathcal{V}(B)$  é sempre positiva e a derivada é sempre negativa, então assintoticamente,  $\mathcal{V}(B \rightarrow \infty) = 0$ .

Vamos exemplificar este método por um exemplo bastante simples: uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  em um campo magnético. Por sua simplicidade intrínseca, as equações de fluxo podem ser resolvidas analiticamente.

## 6.2 Exemplo simples: partícula no campo magnético

Vamos tratar um exemplo extremamente simples onde as ideias de EFs podem ser aplicadas e resolvidas analiticamente. Considere uma partícula de spin  $\frac{1}{2}$  em um campo magnético no plano  $xz$ . Chamemos de  $h$  o campo na direção  $z$  e  $J$  o campo magnético na direção  $x$ . Daí,

$$\mathcal{H} = h\sigma_z + J\sigma_x. \quad (6.8)$$

Vamos restringir  $J$  e  $h$  de tal maneira que  $\sqrt{J^2 + h^2} = 1$ .

Definindo  $\mathcal{H}_0(B=0) = h\sigma_z$  e  $\mathcal{V}(B=0) = J\sigma_x$ , o gerador das transformações infinitesimais  $\eta$  é dado por

$$\eta(B) = -2ih(B)J(B)\sigma_y,$$

enquanto a equação de movimento de  $\mathcal{H}$  é

$$\begin{aligned}
 \frac{d\mathcal{H}}{dB}(B) &= [\eta, \mathcal{H}], \\
 &= 4hJ(h\sigma_x - J\sigma_z).
 \end{aligned} \quad (6.9)$$

Usando as Eqs. (6.8) e (6.9), encontramos

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{dB}(B) &= h\sigma_z + J\sigma_x = 4hJ(h\sigma_x - J\sigma_z), \\ \implies \frac{dh}{dB} &= 4hJ^2, \end{aligned} \quad (6.10)$$

$$\implies \frac{dJ}{dB} = -4h^2J. \quad (6.11)$$

Combinando as Eqs. (6.10) e (6.11), achamos que a variável radial é uma constante de movimento,

$$\frac{d}{dB}(h^2(B) + J^2(B)) = 0 \implies h^2(B) + J^2(B) = 1. \quad (6.12)$$

Uma parametrização conveniente para os graus de liberdade restantes é feita em termos de funções trigonométricas

$$h(B) = \cos \theta(B), \quad (6.13)$$

$$J(B) = \sin \theta(B), \quad (6.14)$$

o que leva à seguinte equação para a evolução do ângulo

$$\frac{d\theta}{dB} = -2 \sin(2\theta). \quad (6.15)$$

Integrando ambos os lados e usando as condições iniciais, chegamos a

$$\begin{aligned} \int d(2\theta) \frac{1}{\sin 2\theta} &= -4B, \\ \implies \tan \theta(B) &= \frac{J(0)}{h(0)} e^{-4B}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Quando  $B \rightarrow \infty$ ,  $\tan \theta$  se anula, o que implica  $h(\infty) = 1$  e  $J(\infty) = 0$  e, portanto, o Hamiltoniano é diagonal

$$\mathcal{H}(B \rightarrow \infty) = \sigma_z. \quad (6.17)$$

Além disso, da Eq.(6.16), vemos que o decaimento dos termos fora da diagonal é exponencial. Nem sempre o decaimento é exponencialmente rápido, conforme ficará evidente no próximo Capítulo. Neste exemplo, o processo de diagonalização é o mesmo que aquele obtido por uma rotação do vetor representado na Fig. 6.2 que o traz paralelo ao eixo  $z$ , representado por  $h$  na figura.

Este exemplo simples ilustra os passos básicos para a implementação das EFs, e pode ser usado como base para o leitor caso o Capítulo seguinte se torne muito denso.

### 6.3 Conclusões

Introduzimos neste Capítulo o método das EFs, caracterizando suas principais propriedades. Outros geradores além do proposto neste Capítulo podem ser usados, dependendo do problema a ser estudado. Deve-se mostrar, contudo, que o método converge assintoticamente, dependendo do gerador escolhido. Através de um exemplo simples, delimitamos o modo como a técnica pode ser usada. Primeiro, calcula-se o gerador e as FEs, para depois, se possível, integrá-las. Obviamente, em problemas de relevância não será possível fazer a integração analiticamente. Para tanto, aproximações fisicamente razoáveis devem ser introduzidas.

# Capítulo 7

## Equações de fluxo aplicadas ao Hamiltoniano de Anderson

Neste Capítulo, aplicaremos o método de Equações de Fluxo introduzido no Capítulo 6 para o modelo de Anderson com hoppings de longo alcance. No modelo onde somente hoppings entre primeiros vizinhos estão presentes, o sistema é sempre localizado quando a desordem diagonal é finita. No caso de hoppings de longo alcance, por outro lado, existe uma transição entre uma fase localizada e uma fase delocalizada [39].

Destacamos que o diagrama de fases completo do sistema, que revisitamos neste Capítulo sob a óptica das Equações de Fluxo, foi estudado anteriormente por Mirlin e colaboradores [39] usando técnicas de supersimetria.

Este Capítulo é organizado da seguinte maneira. Na Seção 7.1, introduzimos o modelo de Anderson com hoppings de longo alcance, assim como seu diagrama de fases, o que inclui uma descrição qualitativa da delocalização a partir da contagem do número de ressonâncias. A seguir, na Seção 7.2, partimos para o desenvolvimento do método, calculando as Equações de Fluxo. O grupo de renormalização baseado nas Equações de Fluxo é derivado na Seção 7.3. Na Seção 7.4, apresentamos a solução de ponto fixo válida no ponto crítico. Na Seção 7.5, nos focamos nos resultados numéricos do fluxo e finalmente, na Seção 7.6, listamos conclusões e direções futuras.

### 7.1 Modelo de Anderson com interações de longo alcance

Introduzimos agora o modelo que será nosso objeto de estudos neste Capítulo. Trata-se do Hamiltoniano desordenado de férmions com hopping de longo alcance, na presença de um campos magnéticos externo, de valores aleatórios em sítios distintos. Este modelo, chamado modelo de Anderson com interações de longo alcance, também é conhecido como PRBM (do inglês *Power-law Random Banded Matrix*). O Hamiltoniano, escrito na forma de segunda quantização é

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij}^j c_i^\dagger c_j + \sum_i h_i c_i^\dagger c_i, \quad (7.1)$$

onde  $h_i$  e  $J_{ij}^j$  são variáveis aleatórias, e  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons no sítio  $i$ . Neste modelo, os hoppings  $J_{ij}^j$  podem ser escritos como  $J_{ij}^j = \frac{G_{ij}^j}{|i-j|^\alpha}$ , onde  $G_{ij}^j$  são variáveis aleatórias cujo desvio padrão é independente dos índices  $i$  e  $j$ . O expoente  $\alpha > 0$  é responsável pelo decaimento dos hoppings e é o parâmetro de ajuste na transição entre a fase delocalizada e localizada, desde que a desordem em  $h$  seja mantida finita.

#### 7.1.1 Diagrama de fases

Este modelo foi extensivamente estudado anteriormente para  $\alpha$  genérico usando o método de supersimetria [39]. O diagrama de fases encontrado está representado na Fig. 7.1. O ponto crítico é atingido com expoente  $\alpha = 1$ . Mostraremos, na sequência, como o método de Equações de Fluxo pode ser aplicado neste problema mas, antes disso, faremos uma revisão de algumas das propriedades do modelo e argumentaremos qualitativamente o porquê de uma transição de fase ser esperada em  $\alpha = 1$ , seguindo argumentos desenvolvidos por Levitov, para um sistema análogo [82, 83].

##### 7.1.1.1 Limites $\alpha \rightarrow 0$ e $\alpha \rightarrow \infty$

Vamos agora examinar a física do modelo introduzido na Eq. (7.1) para dois casos limites,  $\alpha = 0$  e  $\alpha \rightarrow \infty$ . No limite  $\alpha = 0$ , o Hamiltoniano corresponde a uma matriz aleatória do chamado “Gaussian Orthogonal Ensemble” (GOE). As propriedades dos autovalores e autovetores são dadas pela teoria de matrizes aleatórias (RMT, sigla

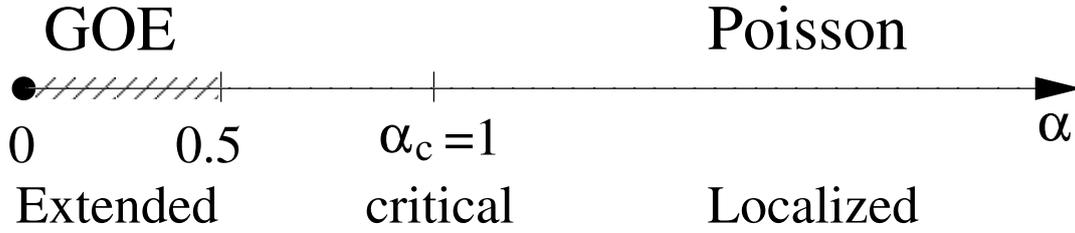


Figura 7.1: Diagrama de fases do modelo de férmions unidimensional com energias intra-sítios desordenadas, e hoppings com decaimento de lei de potência, com expoente  $\alpha$ , baseado na Ref. [39]. Para  $\alpha < \frac{1}{2}$ , o sistema é delocalizado e equivalente ao “ensemble” Gaussiano Ortogonal de matrizes aleatórias (GEO, da sigla para “Gaussian Orthogonal Ensemble”), onde o expoente  $\alpha$  é igual a zero. O sistema é localizado para  $\alpha > 1$ , enquanto na região  $\frac{1}{2} < \alpha < 1$  o sistema é equivalente a um metal em dimensão  $\frac{1}{\alpha - \frac{1}{2}}$ . A região  $0 < \alpha < \frac{1}{2}$  é estudada por nós pela técnica das FEs. Para  $\alpha > \frac{1}{2}$ , um esquema de grupo de renormalização é desenvolvido baseado nestas equações, o que permite estudar, por exemplo, a estatística de níveis do sistema. Note que o ponto crítico  $\alpha_c = 1$  está contido dentro da região de validade do procedimento de grupo de renormalização.

da expressão para “Random Matrix Theory”). Dado o conjunto de autovalores do problema  $\{E_i\}$ , ordenados em ordem crescente, definimos o espaçamento de níveis como sendo

$$\delta_i = E_{i+1} - E_i > 0 \quad (7.2)$$

A distribuição de valores de  $\delta_i$ ,  $P(\delta_i)$ , é nula no limite  $\delta_i \rightarrow 0$ , isto é, os autovalores apresentam repulsão de níveis. Quando este é o caso, pode-se mostrar que a fase é delocalizada [84], e todos os orbitais de partícula única são estendidos. A variável  $\tilde{\delta}$  é definida como sendo a razão de  $\delta_i$  pelo seu valor médio  $\langle \delta_i \rangle$  e sua distribuição  $P(\tilde{\delta}_i)$  é a chamada distribuição de Wigner-Dyson, dada por [84, 85]

$$P(\tilde{\delta}) = \frac{\pi \tilde{\delta}}{2} \exp\left(-\frac{\pi}{4} \tilde{\delta}^2\right). \quad (7.3)$$

Note o caráter universal da distribuição, independente da distribuição de  $h_i$  e  $G_i^j$ .

No limite oposto, quando  $\alpha \rightarrow \infty$ , somente hoppings de primeiros vizinhos são relevantes e o Hamiltoniano é um isolante de Anderson [34] sempre que a distribuição de  $h$  tiver largura finita. Em tal fase, todos os orbitais são exponencialmente localizados. Em contraste com a fase delocalizada, os níveis de energia não experimentam repulsão de níveis e a distribuição  $P(\delta_i)$  é do tipo Poisson [84, 85], isto é,

$$P(\tilde{\delta}) = \exp(-\tilde{\delta}). \quad (7.4)$$

Novamente o caráter universal deve ser ressaltado.

### 7.1.1.2 O ponto crítico

O modelo PRBM apresenta um ponto crítico quando o expoente  $\alpha$  é igual a 1. Os autoestados têm comportamento multicrítico [39] e os autovalores apresentam repulsão de níveis, com estatística intermediária entre a distribuição de Wigner-Dyson (Eq. (7.3)) e Poisson (Eq. (7.4)).

A transição entre a fase localizada e estendida é gerada pela proliferação de ressonâncias pelo sistema, cujos tamanhos passam a ser da ordem do tamanho do sistema,  $L$ . Dizemos que dois sítios  $i$  e  $j$  estão em ressonância quando os parâmetros  $J_i^j$ ,  $h_i$  e  $h_j$  satisfizerem  $J_i^j > |h_i - h_j|$ . Isto porque a amplitude da função de onda passa a ser apreciável tanto no sítio  $i$  quanto no sítio  $j$ . Deve ser possível, então, pela contagem das ressonâncias, ter um entendimento qualitativo da transição. Seja  $P(R)$  a probabilidade de um sítio  $i$  estar em ressonância com um sítio a uma distância  $R$ . Assumindo que a densidade de estados  $n$  seja constante, o espaçamento de níveis característico  $\Delta(k, R)$  em uma casca de espessura  $dR$  é  $\Delta(k, R) \sim \frac{1}{n} \frac{1}{dR}$ , enquanto o hopping típico é  $J(k, R) \sim \frac{1}{R^\alpha}$ . O número de ressonâncias entre  $R$  e  $R + dR$  é dado pela razão entre  $J$  e  $\Delta$ ,

$$P(R) dR \propto \frac{J(k, R)}{\Delta(k, R)}, \quad (7.5)$$

$$= \frac{1}{R^\alpha} dR. \quad (7.6)$$

O número total de sítios em ressonância  $N_r$ , para qualquer comprimento  $r > R$  é obtido integrando  $P(R)$  entre  $R$  e o tamanho do sistema,  $L$ :

$$N_r(r > R) = \int_R^L dR' P(R') \propto \begin{cases} \log\left(\frac{L}{R}\right) & , \text{ para } \alpha = 1 \\ \frac{1}{R^{\alpha-1}} & , \text{ para } \alpha > 1 \\ L^{1-\alpha} & , \text{ para } \alpha < 1 \end{cases}$$

onde mantivemos somente os termos mais relevantes no limite termodinâmico, de  $L$  grande. Conclui-se, portanto, que na fase delocalizada, de  $\alpha < 1$ , o número de ressonâncias diverge, enquanto se mantém finito na fase localizada e, portanto, irrelevante no limite termodinâmico. No ponto crítico  $\alpha = 1$  o número de ressonâncias diverge logaritmicamente, o que sugere que este seja um ponto de transição entre fases. Uma análise completa do ponto crítico, incluindo um procedimento de grupo de renormalização apropriado, foi feita por Levitov [82, 83] em  $D$  dimensões.

Na próxima Seção, começamos a construção do método das EFs para estudar este problema. Esta é a primeira aplicação de tal método para sistemas desordenados.

## 7.2 Equações de fluxo para o problema de Anderson

Nesta Seção, discutimos a aplicação das EFs para o Hamiltoniano introduzido na Eq. (7.1). Neste Capítulo, usaremos  $\Gamma$  como sendo a variável de fluxo, em contraste ao Capítulo anterior onde usamos  $B$ . Os acoplamentos do Hamiltoniano passam a ser funções do parâmetro  $\Gamma$ . Separando o Hamiltoniano em duas partes, uma delas sendo a parte diagonal  $\mathcal{H}_0$ , e o restante, fora da diagonal, sendo  $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$ . Explicitamente,

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i h_i(\Gamma) c_i^\dagger c_i, \quad (7.7)$$

$$\mathcal{V} = \sum_{i,j} J_i^j(\Gamma) c_i^\dagger c_j, \quad (7.8)$$

onde  $J_i^j = J_j^i$  garante que o Hamiltoniano seja hermitiano.

Calculando explicitamente as EFs partindo da Eq. (6.2), o que é uma tarefa longa mas direta, encontramos

$$\frac{dJ_i^j}{d\Gamma} = -4J_i^j (x_j^i)^2 - 4 \sum_{k=1}^N J_i^k J_k^j (x_k^j - x_i^k), \quad (7.9)$$

$$\frac{dh_i}{d\Gamma} = -8 \sum_{k=1}^N (J_k^i)^2 x_i^k, \quad (7.10)$$

onde definimos  $x_j^i = h_i - h_j$ . As distribuições de probabilidade associadas às variáveis  $J_i^j$  e  $h_i$  também passam a depender de  $\Gamma$ . As condições iniciais para os acoplamentos são  $J_i^j(\Gamma = 0) = J_i^j$  e  $h_i(\Gamma = 0) = h_i$ . Como consequência do Hamiltoniano se tornar diagonal no limite em que  $\Gamma \rightarrow \infty$ , temos  $J_i^j(\Gamma \rightarrow \infty) = 0$ . O conjunto de equações de fluxo, (7.9) e (7.10), está representado esquematicamente na Fig. 7.2.

Note que na Eq. (7.9) que dita a evolução de  $J_i^j$ , o termo  $-4J_i^j (x_j^i)^2$  é responsável pelo seu decaimento a zero, assintoticamente. Os outros termos da Eq. (7.9),  $4 \sum_{k=1}^N J_i^k J_k^j (x_k^j - x_i^k)$ , são termos de fonte que retroalimentam o acoplamento  $J_i^j$  através do valor dos hoppings que conectam sítios arbitrários aos sítios  $i$  ou  $j$ . O espectro de partícula única é encontrado através da coleção de campos  $\{h_i(\Gamma \rightarrow \infty)\}$ .

As equações de fluxo podem ser resolvidas numericamente, o que fazemos usando o software MATHEMATICA 9. Na Fig. 7.3, representamos um fluxo típico do problema de 5 sítios para  $\alpha = 1$  e  $G_i^j$  escolhido de uma distribuição Gaussiana de média zero e desvio padrão unitário. As diferentes cores correspondem a diferentes distâncias entre sítios. Várias características do fluxo podem ser visualizadas a partir deste gráfico. Primeiramente, e mais óbvia, é que todos os termos  $J_i^j$  tendem a zero assintoticamente. Além disso, o decaimento de acoplamentos a distâncias maiores pode ser mais lento que o de distâncias menores e estes acoplamentos de longa distância podem inclusive ter grandes amplitudes em estágios intermediários do fluxo. Note ainda na Figura que um dos acoplamentos em vermelhos,  $J_1^2$ , decai muito mais lentamente que os outros, o que é consequência dos dois níveis de energia  $h_1(\infty)$  e  $h_2(\infty)$  serem próximos. Lembre-se que o decaimento de  $J_1^2$  proporcional a  $(h_1 - h_2)^2$ . A Fig. 7.3 também contém o gráfico de  $h_i(\Gamma)$  como função de  $\Gamma$ , em azul, e os autovalores obtidos por diagonalização exata, em amarelo, evidenciando que uma concordância boa mesmo se o fluxo for truncado antes dos  $J_i^j$  serem, de fato, muito pequenos. A estatística de níveis, que depende da diferença de energias, fica comprometida com esse truncamento, especialmente para níveis próximos.

Nas Seções seguintes, exploramos o conjunto de equações diferenciais, Eqs. (7.10) e (7.9). Começamos resolvendo o problema de dois sítios analiticamente, para ganhar intuição sobre a solução. O exemplo de dois

$$\begin{aligned}
 \frac{dJ_i^j}{d\Gamma} &= \sum_k \begin{array}{c} \text{---} J_i^k \text{---} \\ \text{---} J_k^j \text{---} \\ \text{---} h_i \text{---} h_k \text{---} h_j \text{---} \end{array} \\
 &+ \begin{array}{c} \text{---} J_i^j \text{---} \\ \text{---} h_i \text{---} h_j \text{---} \end{array} \\
 \frac{dh_i}{d\Gamma} &= \sum_k \begin{array}{c} \text{---} (J_i^k)^2 \text{---} \\ \text{---} h_i \text{---} h_k \text{---} \end{array}
 \end{aligned}$$

Figura 7.2: Representação pictórica das EFs para os hoppings e campos, representando as Eqs. (7.9) e (7.10). Todos os termos são produtos de três constantes de acoplamento. Para os hoppings, a primeira contribuição vem de uma combinação de termos do tipo  $JJh$ , ou seja, dois termos de hoppings e um termo de campo magnético. A segunda contribuição vem de  $Jhh$ , o produto de dois campos e um hopping. Para a renormalização dos campos, todas as contribuições são do tipo  $JJh$ .

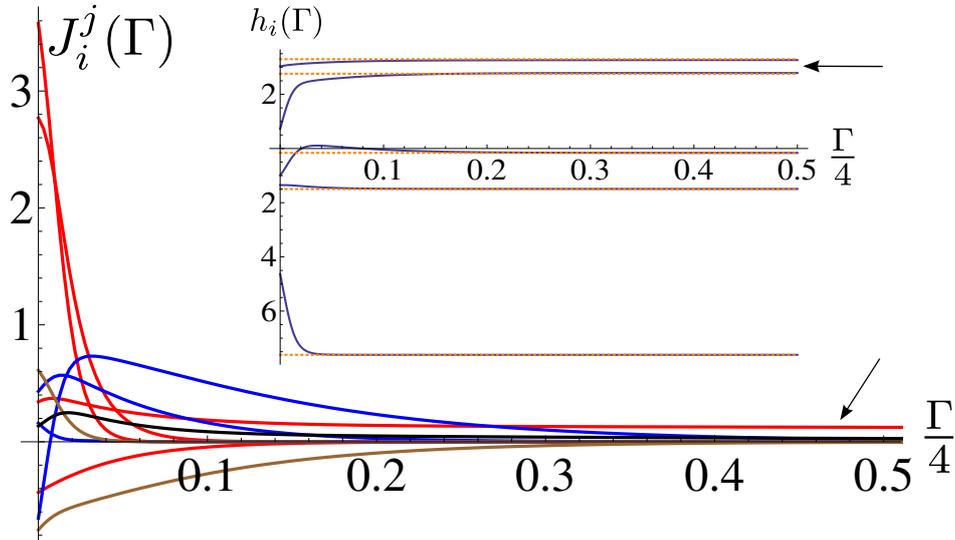


Figura 7.3: Fluxo típico para o problema de 5 spins. Os campos e hoppings iniciais são variáveis aleatórias. Os hoppings seguem  $J_i^j = \frac{G_i^j}{|i-j|^\alpha}$ , sendo  $G_i^j$  variáveis Gaussianas e  $\alpha = 1$ . As cores distintas representam as diferentes distâncias  $|i-j|$ . As curvas em vermelho são de acoplamento de primeiros vizinhos, as azuis são de acoplamento de segundos vizinhos, as marrons são de acoplamento de terceiros vizinhos, enquanto a curva preta corresponde ao hopping do sítio 1 para o sítio 5, correspondendo ao caso de quartos vizinhos. Também representado na Figura (inset) o fluxo de campos, com os autovalores obtidos a partir de diagonalização exata representados em amarelo escuro. As setas em preto representam um caso onde o fluxo do acoplamento  $J_i^j$  para zero é lento, o que é consequência de dois níveis de energia serem próximos (seta no inset). Lembre-se que o termo de decaimento é proporcional à diferença entre os campos (Eq. (7.9)).

sítios é também fundamental para o método de grupo de renormalização que desenvolveremos subseqüentemente, na Seção 7.3.

### 7.2.1 Solução do problema de dois sítios

Como um primeiro passo, vamos resolver o problema de dois sítios, com campos  $h_1$  e  $h_2$  e hopping,  $J \equiv J_1^2$ . Definindo  $x = h_2 - h_1$ , as EFs, Eqs. (7.10) e (7.9), se reduzem a

$$\frac{d}{d\Gamma} J(\Gamma) = -4J(\Gamma)(x(\Gamma))^2, \quad (7.11)$$

$$\frac{d}{d\Gamma} x(\Gamma) = 16(J(\Gamma))^2 x(\Gamma). \quad (7.12)$$

Da combinação das duas equações acima, surge naturalmente uma quantidade conservada, que chamamos de  $r$  (em analogia ao raio das coordenadas polares), sendo  $r^2 = 4J(\Gamma)^2 + x(\Gamma)^2$ , com  $\frac{dr}{d\Gamma} = 0$ . Parametrizando em coordenadas polares,  $J(\Gamma) = \frac{r}{2} \sin \theta(\Gamma)$  e  $x(\Gamma) = r \cos \theta(\Gamma)$ , obtemos a equação de evolução para  $\theta(\Gamma)$ ,

$$\frac{d\theta}{d\Gamma} = -2r^2 \sin 2\theta(\Gamma), \quad (7.13)$$

onde a condição inicial é  $\theta(0) = \arctan\left(\frac{2J(0)}{x(0)}\right)$ . A solução desta equação é  $\tan \theta(\Gamma) = \tan \theta(0) \exp(-2r^2\Gamma)$ . Claramente, no limite de tempo longo  $\Gamma \rightarrow \infty$ , o limite do ângulo é  $\theta(\Gamma \rightarrow \infty) = 0$ . O decaimento de  $\tan \theta(\Gamma)$  dá uma escala natural de tempo no fluxo  $\tau_\Gamma \sim \frac{1}{2r^2}$ , que é o intervalo após o qual o Hamiltoniano de dois spins se torna próximo de diagonal. Chamando  $J_0 = J(0)$  e  $x_0 = x(0)$ , temos a evolução completa de  $J$  e  $x$

$$J(\Gamma) = \tan \theta(0) \frac{\exp(-32r^2\Gamma) \sqrt{(2J_0)^2 + x_0^2}}{\sqrt{(2J_0)^2 \exp(-64r^2\Gamma) + x_0^2 \exp(64r^2\Gamma)}}, \quad (7.14)$$

$$x(\Gamma) = x_0 \frac{\exp(32r^2\Gamma) \sqrt{(2J_0)^2 + x_0^2}}{\sqrt{(2J_0)^2 \exp(-64r^2\Gamma) + x_0^2 \exp(64r^2\Gamma)}}, \quad (7.15)$$

No caso de dois sítios, a equação para a distribuição de probabilidade pode ser resolvida exatamente. As variáveis mais simples para resolver esta equação são  $r$  e  $\tan \theta$ . Em termos destas, a distribuição conjunta  $\tilde{P}$  é

$$\tilde{P}(\tan \theta(\Gamma), r(\Gamma)) = \tilde{P}(\tan \theta_0, r_0) \exp(4r_0^2 t), \quad (7.16)$$

sendo  $\tilde{P}(\tan \theta_0, r_0)$  a distribuição inicial de  $\tan \theta$  e  $r$ . A distribuição de probabilidade das variáveis  $(J, x)$  é obtida usando o Jacobiano da transformação  $(\tan \theta, r) \rightarrow (J, x)$ , e fornece

$$P(J, x) = P(J_0, x_0) \frac{(x^2 + 4J^2)}{(x^2 + 4J^2 \exp[2(16J^2 + 4x^2)\Gamma])} \exp[(16J^2 + 4x^2)\Gamma]. \quad (7.17)$$

A solução revela que as distribuições de  $\log J(\Gamma)$  e  $x(\Gamma)$  são correlacionadas, o que tem origem no fato de que as equações de fluxo vinculam  $x$  e  $J$  de acordo com  $4x^2\Gamma \propto -\log(J)$ . Esta não é uma propriedade exclusiva de cadeias de dois sítios: correlações análogas entre  $J$  e  $x$  são também observadas em cadeias maiores. Na Fig. (7.4), graficamos  $\log J(\Gamma)$  e  $x(\Gamma)$  em  $\Gamma = 6$ . Os acoplamentos iniciais  $(J_0, x_0)$  foram escolhidos com  $J_0$  e os campos  $h_1$  e  $h_2$  uniformemente distribuídos entre 0 e 1.

Os resultados encontrados nesta Seção serão fundamentais na construção de um método de grupo de renormalização baseado nas EFs (Seção 7.3). Antes disso, vamos explorar o conjunto de equações no problema de  $N$  sítios, o que nos permitirá desvendar a física de uma grande fração do diagrama de fases.

### 7.2.2 Problema de $N$ sítios

Passamos agora para a análise do problema de  $N$  sítios. Se mostrará útil trabalhar com a variável  $G_i^j = J_i^j l^{-\alpha}$ , onde  $l = |i - j|$ . As distribuições iniciais para os hoppings  $J(l = |j - i|)$ ,  $P_l\left(\frac{J_i^j}{l}\right)$ , têm uma variância que escala com  $l$  de acordo com  $\sigma_J^2(l) \sim l^{-2\alpha}$ . Vamos assumir, sem perda de generalidade, que  $j > i$ . A EF Eq. (7.9) reescrita para  $G \equiv G_i^j$  se torna

$$-\frac{1}{4} \frac{dG}{d\Gamma} = \sum_{k=1}^N X_k \left[ \frac{|i-j|}{|k-i||j-k|} \right]^\alpha + G(x_j^i)^2, \quad (7.18)$$

$$= \Delta(l) + G(x(l))^2 \quad (7.19)$$

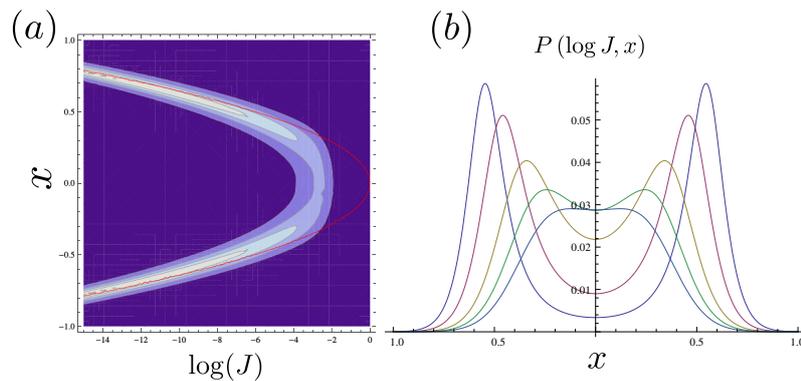


Figura 7.4: (a) Gráfico de densidade da distribuição de  $x$  e  $\log J$  para  $\Gamma = 6$ . Em vermelho, a curva  $4x^2\Gamma = -\log(J)$ , que corresponde à região de maior densidade para valores pequenos de  $\log J$ . (b) Gráfico da distribuição de probabilidade (Eq. (7.17)) em diversos cortes, quando  $\log J = -5$  (azul),  $-4$  (roxo),  $-3$  (amarelo),  $-2.5$  (verde),  $-2.2$  (azul), sendo  $\Gamma = \frac{10}{3}$ .

onde  $X_k = G_i^k G_k^j (x_k^j - x_i^k)$  é uma variável aleatória, cujo desvio padrão é independente da distância. Definimos também  $\Delta(l) = \sum_{k=1}^N X_k \left[ \frac{|i-j|}{|k-i||j-k|} \right]^\alpha$ . Há dois tipos de termo na Eq. (7.18). O termo  $G(x(l))^2$  é responsável pelo decaimento da magnitude de  $G$ , enquanto  $\Delta(l)$  é uma fonte aleatória que retroalimenta a distribuição de  $G$  com distribuições com outras leis de potência.

Qual é o comportamento do termo de fonte  $\Delta(l)$ ? Esta questão é fundamental na análise da proliferação de ressonâncias, mecanismo este responsável por uma possível delocalização do sistema. Assumimos que  $X_k$ , além de ser uma variável aleatória independente de escala, seja também não correlacionada, isto é

$$\langle X_k X_{k'} \rangle = \langle X_k^2 \rangle \delta_{kk'}. \quad (7.20)$$

A variância do termo de fonte  $\Delta(l)$  é dada por

$$\sigma_\Delta^2(l) = \langle X_k^2 \rangle \left( \sum_{k=1}^N \frac{l^{2\alpha}}{|k-i|^{2\alpha} |l-(k-i)|^{2\alpha}} \right), \quad (7.21)$$

$$\approx \langle X_k^2 \rangle l^{2\alpha} \int_1^l \frac{dx}{x^{2\alpha} (l-x)^{2\alpha}} + \left( \int_1^{i-1} + \int_1^{N-j} \right) \frac{dx}{x^{2\alpha} (l+x)^{2\alpha}}. \quad (7.22)$$

A integral é dominada pelos pontos de divergência do integrando, que são  $x=0$  e  $x=l$ . No caso em que  $\alpha < \frac{1}{2}$ , podemos mudar variáveis na integração de maneira a explicitar a dependência em  $l$ . Segue que

$$\int_1^{l/2} \frac{dx}{x^{2\alpha} (l-x)^{2\alpha}} \sim l^{1-4\alpha} \int_{\frac{1}{l}}^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{x^{2\alpha} (1-x)^{2\alpha}} \propto l^{1-4\alpha} \quad (7.23)$$

e, portanto, esperamos que  $\sigma_\Delta^2(l) \propto l^{1-2\alpha}$ . No ponto  $\alpha = \frac{1}{2}$  a variância depende logarithmicamente de  $l$ , o que indica um comportamento crítico. Finalmente, para  $\alpha > \frac{1}{2}$ , a variância é independente da escala de comprimento,  $\sigma_\Delta^2(l) \sim \text{const}$ .

O termo de fonte é o principal responsável pela mudança na distribuição de acoplamentos  $P_l(J_i^j)$ . É aparente do “scaling” do termo de fonte que a dependência em  $l$  da variância da distribuição de acoplamentos  $\sigma_J(l)$  é modificada durante o fluxo, a menos que  $\alpha = \frac{1}{2}$ . Genericamente, isto implica um ponto fixo em  $\alpha = \frac{1}{2}$ , que também está de acordo com a dependência logarithmica da variância dos termos de fonte  $\sigma_\Delta^2$ . Para expoentes que desviam em  $\epsilon$  do ponto fixo,  $\alpha = \alpha^* - \epsilon$ , o expoente  $\tilde{\alpha}$  gerado pelo termo de fonte é tal que  $\tilde{\alpha} = \alpha^* - 2\epsilon < \alpha$ . Qualitativamente, isto implica que durante o fluxo, os termos de fonte geram distribuições com expoentes menores, o que se torna a contribuição dominante em distâncias longas. Assintoticamente, a distribuição flui para  $\alpha = 0$ . Esses resultados caracterizam a fase de  $\alpha < \frac{1}{2}$  da Fig. 7.1.

Para verificar numericamente as afirmações anteriores, resolvemos numericamente o fluxo de acoplamentos  $J$  e campos  $h$ , Eqs. (7.10) e (7.9), usando o software MATHEMATICA. As simulações foram feitas em cadeias de tamanho  $N = 45$ , o que corresponde a resolver 1035 equações diferenciais não-lineares acopladas. O parâmetro  $\Gamma$  flui de  $\Gamma = 0$  até  $\Gamma = \Gamma_{max}$ , onde  $\Gamma_{max}$  é escolhido de acordo com a desordem nos hoppings, de tal maneira que, conforme nos aproximamos de  $\Gamma_{max}$ , os campos mudem pouco de valor.

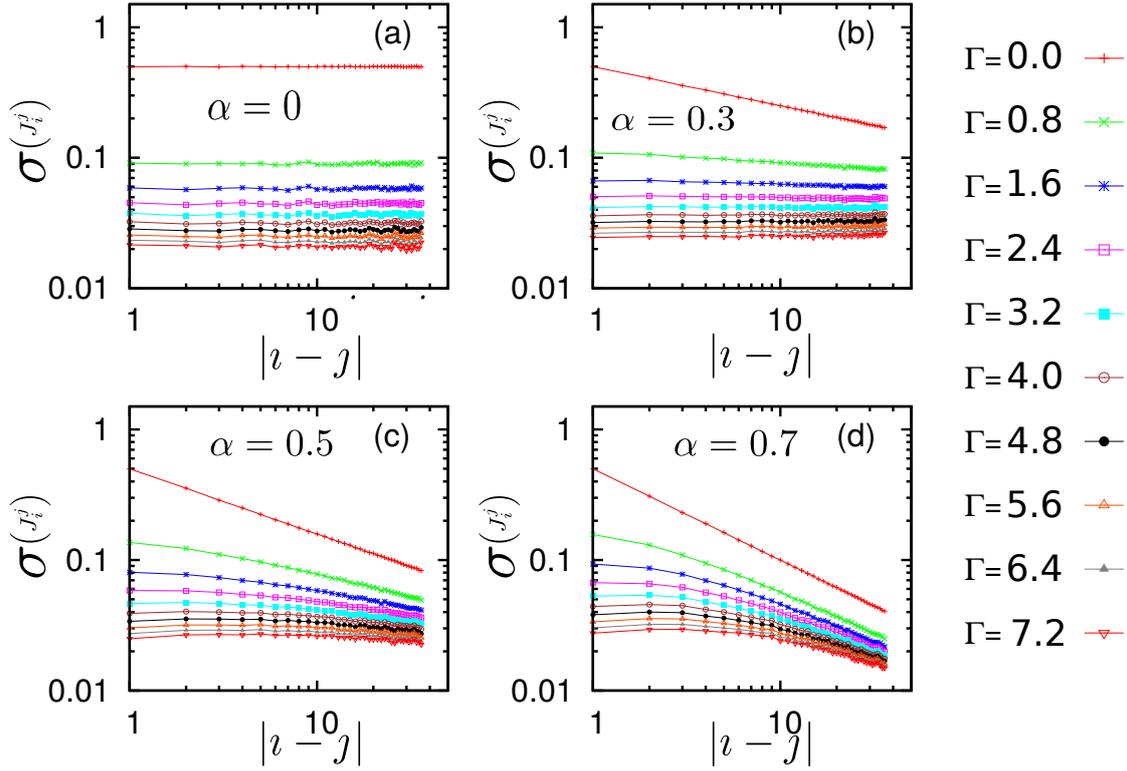


Figura 7.5: Mudança do desvio padrão das distribuições  $\sigma[P(J(l))]$  como função da distância  $l$ , para diferentes valores de  $\Gamma$ . Note que para expoentes  $\alpha < \frac{1}{2}$ , o expoente flui para  $\alpha = 0$ , conforme  $\Gamma$  aumenta. Para expoentes  $\alpha > 0.5$ , a calda inicial de longa distância é mantida inalterada mesmo para  $\Gamma$  alto.

O desvio padrão da distribuição de hoppings  $P_{l,\Gamma}(J)$ , como função de  $l$  e  $\Gamma$  para vários expoentes  $\alpha$  é mostrado na Fig. (7.5). Nas partes (a) e (b) da Figura, onde os expoentes são menores que  $\frac{1}{2}$ , o desvio padrão flui para valores constantes, independentes da distância entre sítios  $l$ , mostrando explicitamente o que concluímos de forma analítica no estudo de  $\sigma_{\Delta}^2$ . O fato de ser independente de  $l$  é comportamento característico do expoente  $\alpha = 0$ . Em contraste, para  $\alpha = 0.7$ , o comportamento de longas distâncias do desvio padrão não se modifica durante o fluxo, ou seja, se mantém  $\sigma_J(l) \sim l^{-\alpha}$  para  $l$  grande. Este comportamento é ilustrado na Fig. (7.5) (d). Em  $\alpha = \frac{1}{2}$ , que é um ponto crítico, a contribuição logarítmica para o desvio padrão em  $\Gamma$  alto não pode ser verificada devido ao tamanho finito do sistema.

### 7.3 Grupo de Renormalização a partir de Equações de Fluxo

Nesta Seção, derivamos um método de grupo de renormalização que usa como base o método das EFs. Posteriormente, mostramos os resultados encontrados a partir desta implementação e discutimos os resultados. A ideia básica deste procedimento é eliminar os termos de fora da diagonal  $J_i^j$  de maneira sistemática.

Para abreviar a notação durante esta subseção, introduzimos a notação  $\tilde{i} = c_i^\dagger$  e  $i \equiv c_i$ . Consideramos a caso de 3 sítios, que será o problema básico sobre o qual o método será construído. O Hamiltoniano de três sítios é dado por

$$\mathcal{H}_{3s} = (\mathcal{H}_0)_{3s} + \mathcal{V}_{3s}, \quad (7.24)$$

sendo

$$(\mathcal{H}_0)_{3s} = h_1 \tilde{1}1 + h_2 \tilde{2}2 + h_3 \tilde{3}3, \quad (7.25)$$

$$\mathcal{V}_{3s} = J_1^2 (\tilde{1}2 + \tilde{2}1) + J_2^3 (\tilde{2}3 + \tilde{3}2) + J_1^3 (\tilde{1}3 + \tilde{3}1). \quad (7.26)$$

Calculando o gerador explicitamente, Eq. 6.2, encontramos

$$\frac{\eta}{4} = J_1^2 (h_1 - h_2) (\tilde{2}1 - \tilde{1}2) + J_2^3 (h_2 - h_3) (\tilde{3}2 - \tilde{2}3) + J_1^3 (h_1 - h_3) (\tilde{3}1 - \tilde{1}3) \quad (7.27)$$

Consideramos  $r_{1,2} \gg r_{2,3}$ . Consideramos a evolução de  $\Gamma$  entre 0 e  $\delta\Gamma$ , sendo  $\delta\Gamma$  escolhido de tal modo que  $\delta\Gamma r_{1,2} \sim 1$ . Neste intervalo, somente os termos conectando os sítios 1 e 2 mudam significativamente. Com isso, a integral do gerador  $\eta$  neste intervalo fornece

$$\begin{aligned} \int d\Gamma \eta &= 4 \int d\Gamma J_1^2 (h_1 - h_2) (\tilde{2}1 - \tilde{1}2) + \mathcal{O}(\delta\Gamma), \\ &= \alpha_{12} (\tilde{2}1 - \tilde{1}2) + \mathcal{O}(\delta\Gamma), \end{aligned} \quad (7.28)$$

onde definimos  $\alpha_{12} = \frac{1}{2} \text{sign}(Jx) \left(\frac{\pi}{2} - |\theta_0|\right)$ , e usamos explicitamente a solução do problema de dois sítios. Correções de ordem superior em  $\delta\Gamma$  podem ser negligenciadas se  $\delta\Gamma r_{2,3} \ll 1$ . Definindo  $A = \int d\Gamma \eta$  e usando a fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$e^A H e^{-A} = H + [A, H] + \frac{1}{2} [A, [A, H]] + \dots \quad (7.29)$$

encontramos que o termo de ordem mais baixa em  $\delta\Gamma$  do comutador  $[A, H]$  é

$$[H, \alpha_{12} (\tilde{2}1 - \tilde{1}2)] = J_2^3 \alpha_{12} (\tilde{3}1 + \tilde{1}3) - J_1^3 \alpha_{12} (\tilde{3}2 + \tilde{2}3). \quad (7.30)$$

Portanto,

$$[A, H] = J_1^3 \alpha_{12} (\tilde{3}2 + \tilde{2}3) - J_2^3 \alpha_{12} (\tilde{3}1 + \tilde{1}3), \quad (7.31)$$

$$[A, [A, H]] = -J_2^3 \alpha_{12} (\tilde{3}2 + \tilde{2}3) - J_1^2 \alpha_{12} (\tilde{3}1 + \tilde{1}3). \quad (7.32)$$

Por indução, é fácil mostrar que a coleção de termos que aparecem na Eq. (7.29) podem ser somados, e resultam em

$$H(\delta\Gamma) = (J_1^3 \cos \alpha_{12} + J_2^3 \sin \alpha_{12}) (\tilde{3}1 + \tilde{1}3) (J_2^3 \cos \alpha_{12} - J_1^3 \sin \alpha_{12}) (\tilde{3}2 + \tilde{2}3). \quad (7.33)$$

Podemos agora enunciar o passo básico do método de GR. A generalização para mais de três sítios é trivial, já que o procedimento de RG pode ser pensado como processos que atuam em blocos do problema de três sítios, enquanto os outros sítios permanecem inalterados.

Em suma, o passo do GR consiste em:

1. Achar o maior valor de  $r = \sqrt{4J^2 + x^2}$  não dizimado. Assuma ser entre os sítios  $i$  e  $j$ , ou seja,  $r_{ij}$ . Renormalize a ligação correspondente  $J_i^j$  para zero.
2. Calcular o ângulo de ligação  $\alpha_{ij} = \frac{1}{2} \text{sign}(J_i^j x_{ij}) \left(\frac{\pi}{2} - |\theta_0|\right)$ , sendo  $x_i^j = h_j - h_i$  e  $\theta_0 = \arctan\left(\frac{2J}{x}\right)$ . Renormalizar todas as ligações que conectam sítios  $k \neq i, j$  aos sítios  $i$  ou  $j$  de acordo com

$$\tilde{J}_i^k = J_i^k \cos(\alpha_{ij}) + J_k^j \sin(\alpha_{ij}), \quad (7.34)$$

$$\tilde{J}_j^k = -J_i^k \sin(\alpha_{ij}) + J_k^j \cos(\alpha_{ij}). \quad (7.35)$$

3. Renormalizar os campos  $h_i$  e  $h_j$  de acordo com

$$\tilde{h}_i = \frac{1}{2} \left[ H_{ij} + r_{ij} \text{sgn}(x_i^j) \right], \quad (7.36)$$

$$\tilde{h}_j = \frac{1}{2} \left[ H_{ij} - r_{ij} \text{sgn}(x_i^j) \right], \quad (7.37)$$

onde  $H_{ij} = h_i + h_j$ .

4. Calcular os valores renormalizados de  $r$ ,  $\tilde{r}_{ik}$  e  $\tilde{r}_{jk}$ .

Na Fig. 7.6, representamos esquematicamente o processo de dizimação de uma ligação.

Note que o número de passos até que o Hamiltoniano se torne diagonal escala com  $N^2$ , onde  $N$  é o tamanho do sistema. Nesta proposta de GR, cada campo  $h_i$  é renormalizado  $\mathcal{O}(N)$  vezes. Para achar o espectro, esta renormalização sucessiva se mostra ser uma vantagem em relação a outras propostas de GR, como aquela feita por Javan Mard *et al.* [86], por exemplo. Na proposta da Ref. [86], são os sítios, e não as ligações, que

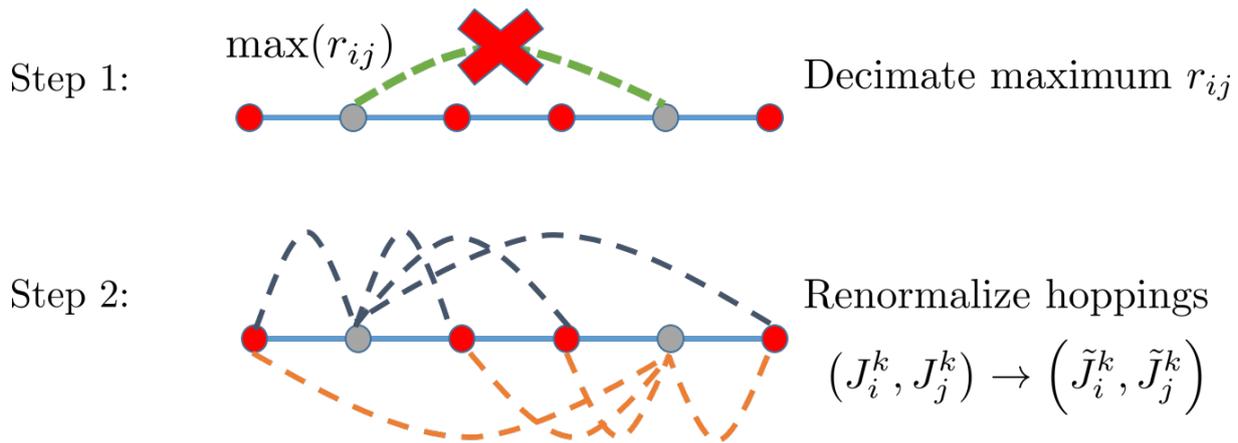


Figura 7.6: Esquema dos passos do GR que usa como base as EFs. O primeiro passo é encontrar a ligação  $(i, j)$  com valor máximo de  $r_{ij}$ , e zerar tal ligação. Ao mesmo tempo, todas as ligações que partem dos sítios  $i$  e  $j$  para outros sítios  $k \neq i, j$  são renormalizadas para  $\tilde{J}_i^k$  e  $\tilde{J}_j^k$ , e os campos em  $i$  e  $j$ , também renormalizados, passam a valer  $\tilde{h}_i$  e  $\tilde{h}_j$ . Este procedimento é iterado até que todas as ligações sejam removidas. O erro no passo de dizimação é menor quando os novos valores  $\tilde{r}_{ik}$  e  $\tilde{r}_{jk}$  são todos menores que  $r_{ij}$ . Depois de  $\frac{N(N-1)}{2}$  passos, o Hamiltoniano é diagonal.

são removidas da cadeia. Os primeiros campos dizimados sequer são renormalizados e, portanto, o espectro encontrado não é o correto, especialmente nas bordas<sup>1</sup>.

O fluxo do GR pode ser interpretado como uma sequência ordenada de rotação do problema de dois sítios, análogo ao algoritmo de Jacobi para a diagonalização de matrizes. A diferença para tal algoritmo é que neste RG que implementamos a hierarquia de dizimações é ditada pelos valores de  $r$ , enquanto no caso de Jacobi o pivô é escolhido como sendo o elemento fora da diagonal de maior valor. O método de Jacobi é iterado até o maior elemento fora da diagonal ser menor que um determinado erro pré-fixado. No nosso RG, o método é iterado  $\frac{N(N-1)}{2}$  vezes, já que, uma vez que uma ligação é removida, não permitimos que ela volte a ter valor finito em passos posteriores. Um detalhe técnico é que verificamos computacionalmente que o nosso processo de RG é mais rápido e permite acesso a sistemas maiores que diagonalização exata. Conforme discutiremos mais à frente, na parte das conclusões, isso permite vislumbrar que, se generalizado apropriadamente, tal método pode ser promissor no estudo de sistemas interagentes.

## 7.4 Equação do grupo de renormalização no ponto crítico

O procedimento de grupo de renormalização proposto por Levitov [82, 83] é baseado na solução da ressonância de dois sítios e cuja estrutura é parecida ao que propomos no ponto crítico  $\alpha = 1$ . Uma diferença importante é que o método de Levitov se baseia em resolver ressonâncias tendo como parâmetro no fluxo a distância entre sítios, que aumenta monotonicamente. Isto é, dado um comprimento genérico, pergunta-se quais sítios separados por esta distância estão em ressonância. Resolve-se os problemas de dois sítios ressonantes e aumenta-se o valor do comprimento. Itera-se estes passos até atingir-se o comprimento do sistema, onde espera-se que todas as ressonâncias sejam resolvidas.

Vamos resolver as ressonâncias em uma casca de raio  $R_0 < r < R_1$ , centrada em uma diferença de campos dada por  $|h_i - h_j|$ . Na variável  $G_i^j$ , fazemos a aproximação que os sítios ressonantes  $i$  e  $j$  estão distantes de um sítio  $k$  arbitrário, isto é,  $|r_k - r_{i,j}| \gg |r_i - r_j|$ . Assumindo que  $|r_k - r_{\pm}| \approx |r_k - r_{i,j}|$ , onde  $r_{\pm} = \frac{1}{2}|r_i \pm r_j|$ , as Eqs. (7.34)-(7.36) podem ser escritas para a variável  $G_k^{\pm} = \tilde{G}_{i,j}^k$ , sendo dadas por

$$G_k^+ \equiv G_k^i \sin \alpha_{ij} + G_k^j \cos \alpha_{ij}, \quad (7.38)$$

$$G_k^- \equiv -G_k^j \sin \alpha_{ij} + G_k^i \cos \alpha_{ij}. \quad (7.39)$$

Note que esta é uma grande simplificação, que só é possível cancelando os denominadores de distância de  $J_i^j = \frac{G_i^j}{|r_i - r_j|}$ .

A ideia é escrever a equação de evolução da variável  $G_i^j$ . Consideremos a densidade de estados como sendo constante e de valor  $\nu$  e a densidade de sítios como sendo  $n$ . Para uma casca cuja diferença de energia é

<sup>1</sup>Deve ser ressaltado, contudo, que na Ref. [86] o intuito era calcular a condutividade, e não a estrutura de níveis. Para tal fim, o método lá implementado mostra-se conveniente.

$dE = d|h_i - h_j|$  e um volume de tamanho  $dr$ , queremos descobrir como a distribuição de  $G_i^j$  é modificada devido a ressonâncias nesta casca.

Considere a dizimação de um par de sítios  $i$  e  $j$  em ressonância. Todos os acoplamentos conectados aos sítios  $i$  e  $j$  serão renormalizados. A modificação da distribuição de probabilidade é dada pelo termo seguinte (para uma analogia com a equação do SDRG, ver Capítulo 2, Eq. (2.13))

$$\int dG_i^j P(G_i^j) \int_{R_1}^{R_2} ndr \int_{E>0} \nu dE \int \prod_k (dG_k^i dG_k^j) P(G_k^i) P(G_k^j) [\delta(G - G_k^+) + \delta(G - G_k^-) - \delta(G - G_k^i) - \delta(G - G_k^j) - \delta(G - G_i^j)] \quad (7.40)$$

Os termos com sinal positivo indicam acoplamentos novos, inseridos na cadeia, enquanto  $G_k^j, G_k^i$  ( $k$  arbitrário) e  $G_i^j$  são removidos.

Conforme acoplamentos são removidos da cadeia, a normalização também muda. O número de acoplamentos removidos é  $\nu dE ndr$  e, portanto, um pré-fator  $(1 - \nu dE ndr)^{-1}$  deve ser incluído para manter  $P(G)$ . A nova distribuição  $\tilde{P}(G)$ , após a dizimação, é dada pela soma da distribuição anterior  $P(G)$  com a contribuição adicional do termo acima

$$\begin{aligned} \tilde{P}(G) &= \frac{1}{1 - \nu dE ndr} \left[ P(G) + \int dG_i^j P(G_i^j) \nu dE ndr \prod_k (dG_k^i dG_k^j) \times \right. \\ &\quad \left. \times P(G_k^i) P(G_k^j) \left( \sum_{k,p=\pm} \delta(G - G_k^p) - \sum_{k,q=i,j} \delta(G - G_k^q) - \delta(G - G_i^j) \right) \right] \end{aligned} \quad (7.41)$$

Simplificando, chegamos a

$$\tilde{P}(G) = P(G) + \nu n \int dG_i^j dE dr P(G_i^j) \int \prod_k dG_k^i dG_k^j P(G_k^i) P(G_k^j) \sum_k \left( \sum_{p=\{\pm\}} \delta(G - G_k^p) - \sum_{p=\{i,j\}} \delta(G - G_k^p) \right) \quad (7.42)$$

Até este ponto, poderíamos pensar em repetir os passos para outros expoentes  $\alpha$  que não sejam o ponto crítico. Aqui, contudo, ficará evidente que uma simplificação essencial é possível exatamente quando  $\alpha = 1$ .

Tomando  $\nu$  e  $n$  constantes, fazemos a seguinte mudança de variáveis na região de integração

$$(r, E, G_i^j) \rightarrow (r, \tau, G_i^j) \quad (7.43)$$

sendo  $d\tau = \frac{d|h_i - h_j|}{|J_i^j|} = \frac{dE}{|J_i^j|}$ .

A casca onde se realiza a integração fica modificada para

$$dr dE dG_i^j = \underbrace{(r^\alpha |J_i^j|)}_{|G_i^j|} (r^{-\alpha} dr) d\tau dG_i^j. \quad (7.44)$$

Integrando sobre o volume, chegamos a

$$I = \int_{R_1}^{R_2} dr r^{-\alpha} = \begin{cases} \log\left(\frac{R_1}{R_0}\right) & , \text{ para } \alpha = 1 \\ \frac{1}{1-\alpha} (R_2^{1-\alpha} - R_1^{1-\alpha}) & , \text{ para } \alpha \neq 1 \end{cases} \quad (7.45)$$

O fato de que em  $\alpha = 1$  temos uma variável adimensional, logarítmica, é o que fará possível a solução da Eq. (7.42) no ponto crítico. Esboçaremos a solução na sequência.

### 7.4.1 Solução no ponto crítico

Passamos à solução da Eq. (7.42) no ponto crítico  $\alpha = 1$ , seguindo alguns passos das Refs. [82, 83]. No ponto crítico, é possível definir a variável logarítmica  $\xi = \log(R)$ . Para simplificar a notação, chamemos  $G_k^i = G^1$ ,  $G_k^j = G^2$  e  $G_i^j = G^0$ . Cada termo da soma sobre  $k$  dá a mesma contribuição. Portanto, a Eq. (7.42) pode ser simplificada para

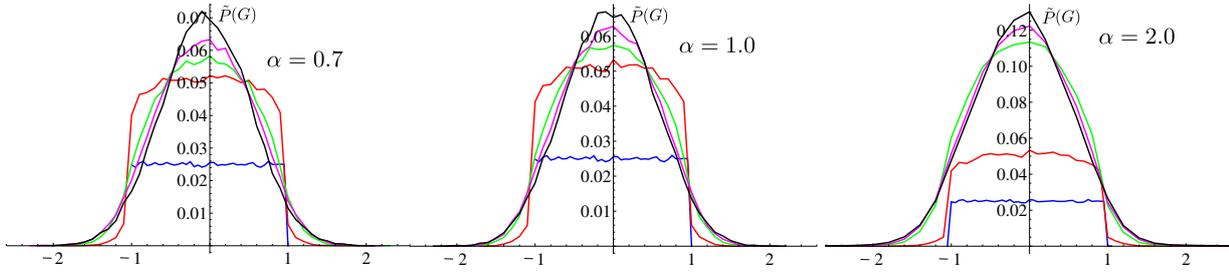


Figura 7.7: Distribuição de valores de  $G = J_i^j |i-j|^\alpha$  não dizimados,  $\tilde{P}(G)$ , durante o fluxo, nos passos  $N_{\text{steps}} = 1$  (azul), 100 (vermelho), 1000 (verde), 2000 (rosa), e 3000 (preto). O número de sítios é  $N_{\text{sites}} = 100$ , e o número total de passos para diagonalizar o Hamiltoniano é  $N_{\text{steps}} = 4950$ . Os expoentes mostrados são  $\alpha = 0.7, 1, 2$ . Em todos os casos, a distribuição inicial de  $G$  é uniforme, de  $-1$  a  $1$  (curva azul). Em passos posteriores do grupo de renormalização, a distribuição de  $G$  se torna gaussiana, uma generalização do comportamento previsto por Levitov para o ponto crítico  $\alpha = 1$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} P(G, \xi) &= n\nu N \int dG^0 P(G^0) |G^0| \int d\tau \int dG^1 dG^2 P(G^1) P(G^2) [\delta(G - G^+) + \delta(G - G^-) \\ &\quad - \delta(G - G^1) - \delta(G - G^2)]. \end{aligned} \quad (7.46)$$

Uma observação importante é que  $G^\pm$  depende somente de  $G^{1,2}$  e  $\tau$ , o que implica que a integral sobre  $G^0$  desacopla das outras, ou seja,  $G^0$  e  $\tau$  podem ser tratados como variáveis independentes. A condição de ponto fixo é que  $\frac{\partial}{\partial \xi} P = 0$  e, portanto, a Eq. (7.42) fica

$$\int d\tau \int dG^1 dG^2 P(G^1) P(G^2) (\delta(G - G^+) + \delta(G - G^-) - \delta(G - G^1) - \delta(G - G^2)) = 0. \quad (7.47)$$

Há duas contribuições distintas, a oriunda dos dois últimos termos, que são idênticos e iguais a  $P(G)$ , e a contribuição menos trivial, dos dois primeiros termos, dada por

$$\int dG^1 dG^2 P(G^1) P(G^2) (\delta(G - G^+) + \delta(G - G^-)) \quad (7.48)$$

$$= \int dG^- P(G^1(G, G^-)) P(G^2(G, G^-)) + \int dG^+ P(G^1(G^+, G)) P(G^2(G^+, G)) \quad (7.49)$$

Pode-se mostrar que a equação acima admite uma solução de ponto fixo gaussiana,

$$P^*(G) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{G^2}{2\sigma^2}\right), \quad (7.50)$$

onde  $\sigma$  é o desvio padrão, mantido invariante durante o fluxo. Note que a norma (e consequentemente, o desvio padrão da distribuição de  $G$ ) é invariante sob a transformação dada nas Eqs. (7.38) e (7.39).

Na Seção seguinte, vamos mostrar os resultados numéricos do fluxo de grupo de renormalização, incluindo evidência que a distribuição de ponto fixo  $P^*(G)$  é gaussiana mesmo fora do ponto crítico  $\alpha = 1$ .

## 7.5 Resultados numéricos

Implementamos o procedimento de grupo de renormalização numericamente, em cadeias de 100 sítios, com a média sendo tomada sobre 20 realizações de desordem. Na Fig. 7.7, mostramos que a distribuição de ponto fixo da variável  $G$  é gaussiana mesmo fora do ponto crítico  $\alpha = 1$ . Analiticamente, não conseguimos mostrar este fato, evidente dos resultados numéricos.

Na Fig. 7.8, comparamos o espectro do Hamiltoniano obtido pelo método do GR com aquele obtido por diagonalização exata. O método fornece autovalores que são cada vez mais próximos do valor obtido por diagonalização exata conforme  $\alpha \rightarrow \infty$ , quando todos os autoestados são localizados. O método se mostra menos confiável quando  $\alpha < 0.5$ , que corresponde à região equivalente ao ensemble de matrizes aleatórias ortogonais. Este fato poderia ter sido previsto pelo fato de que, uma vez removida, uma ligação não pode voltar a ter valores finitos. Quando as ligações renormalizadas  $\tilde{r}_{ik}$  ou  $\tilde{r}_{jk}$  são maiores que  $r_{ij}$ , tal hipótese não pode ser justificada. A estas dizimações que não abaixam a escala de energia chamamos de 'dizimações ruins'. Uma

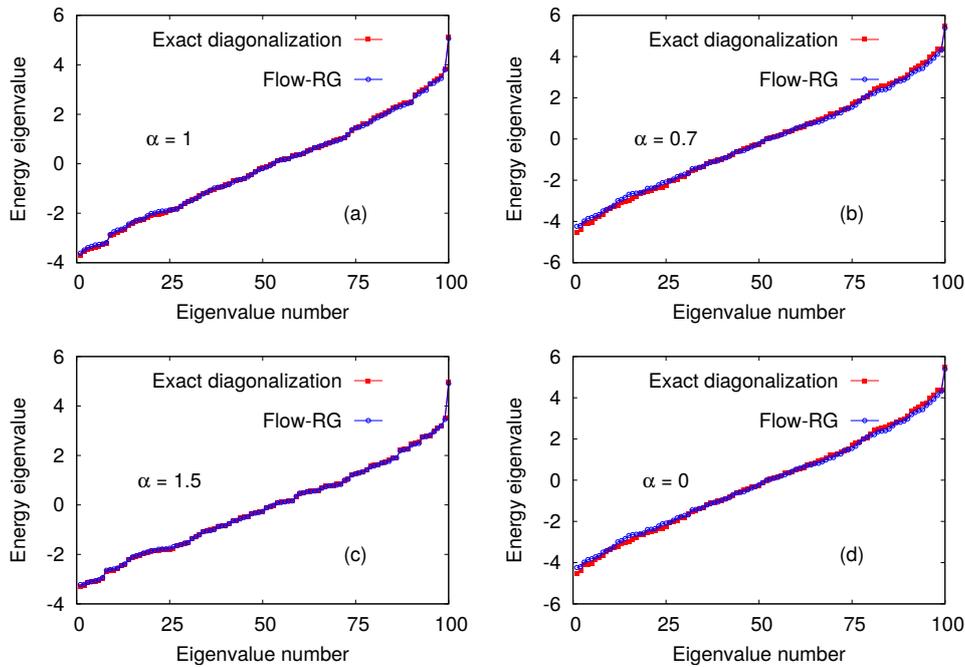


Figura 7.8: Comparação do espectro de partícula única obtido de diagonalização exata (vermelho), em comparação com o espectro obtido pela técnica de GR (azul), para uma dada realização de desordem. De (a) a (d), graficamos os diferentes expoentes  $\alpha = 0, 0.7, 1.0$  e  $1.5$ . Em todos os casos, a concordância é aparente. A análise da estatística de níveis, por outro lado, mostra que o resultado obtido para o espectro é confiável somente para  $\alpha > \frac{1}{2}$ .

possibilidade que vai além do que trabalhamos aqui envolve diagonalizar simultaneamente mais de dois sítios em um único passo de dizimação. Como temos um tratamento de EFs para a região  $\alpha < \frac{1}{2}$ , não buscaremos um método de GR mais acurado nesta região, porém, para outros sistemas tal generalização pode ser necessária.

A questão de acurácia do método pode ser testada analisando numericamente o número de 'dizimações ruins' no limite termodinâmico, que são aquelas que não diminuem o valor do  $r_{i,j}$  máximo. Na Fig. (7.9), mostramos que para  $\alpha > 0.5$  o número de 'dizimações ruins' se anula no limite termodinâmico. Note que no ponto de transição de localização,  $\alpha = 1$ , o método aqui proposto é eficaz.

O espectro e análise da estatística de níveis para  $\alpha > 0.5$  também pode ser obtido partindo do esquema de grupo de renormalização. A estatística de níveis será sempre normalizada pelo valor médio da distribuição  $\langle \delta \rangle$ . A distribuição  $P\left(\tilde{\delta} = \frac{\delta}{\langle \delta \rangle}\right)$  é calculada em função do distanciamento de níveis dividido por seu valor médio no estágio final do fluxo,  $\Gamma \rightarrow \infty$ , quando o Hamiltoniano é diagonal. Os resultados mostrados na Fig. (7.10) indicam que o método é eficiente para determinar a estatística de níveis correta. Os expoentes mostrados são  $\alpha = 0.7, 1, 2, 5$ , de onde se vê o deslocamento da curva, começando próxima à distribuição de Wigner-Dyson, e indo na direção da distribuição de Poisson. Um pequeno peso resta em  $\tilde{\delta} = 0$ , consequência da diagonalização numérica ser feita em um sistema de tamanho finito.

## 7.6 Conclusões

Neste Capítulo, aplicamos, de maneira pioneira, o método de Equações de Fluxo para sistemas desordenados. Uma aplicação completa do método no caso desordenado passa por derivar as equações usando o gerador de transformações unitárias, dado na Eq. (6.2), e seguir a distribuição de acoplamentos até o parâmetro de fluxo, que chamamos de  $\Gamma$ , ser suficientemente alto. Obviamente, já que o método se propõe a deixar o Hamiltoniano diagonal, assintoticamente, a distribuição de hoppings tenderá a deltas de Dirac centradas em zero. O interessante é, portanto, extrair informações das distribuições de hoppings durante o fluxo.

No caso do modelo que estudamos, no qual a distribuição de hoppings decai como lei de potência da distância entre sítios, uma informação possível é o desvio padrão das distribuições de probabilidade em função da distância, para vários  $\Gamma$  (ver Fig. 7.5). De fato, fomos capazes de distinguir o caráter delocalizado da fase de  $\alpha < \frac{1}{2}$  vendo que o desvio padrão se torna independente da distância, uma característica típica do caso em que  $\alpha = 0$ , onde o Hamiltoniano é equivalente ao ensemble de matrizes aleatórias ortogonais.

A solução numérica das Equações de Fluxo nem sempre é computacionalmente simples, já que envolve um sistema de  $\sim N^2$  equações diferenciais não-lineares acopladas, no caso não-interagente. No caso interagente, o

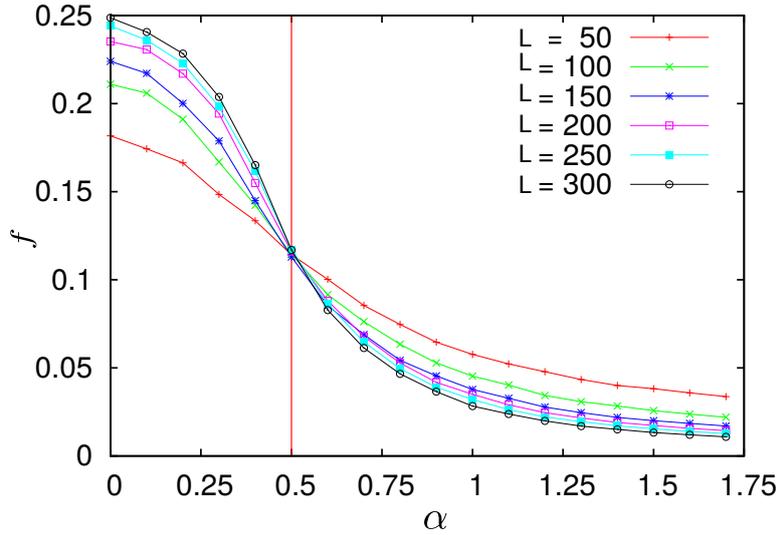


Figura 7.9: Fração de dizimações que não reduzem a escala de energia  $\max(r_{i,j})$ , durante o fluxo. As curvas são função do expoente  $\alpha$  e diferentes curvas representam diferentes tamanhos do sistema  $N_{\text{sites}}$ . No limite termodinâmico, a fração de dizimações que não abaixam a escala de energia tende a zero para  $\alpha > \frac{1}{2}$ , o que indica que o método é eficaz nesta região. Como das EFs obtemos uma fase delocalizada para  $\alpha < \frac{1}{2}$ , então temos acesso ao diagrama de fases para todos os expoentes.

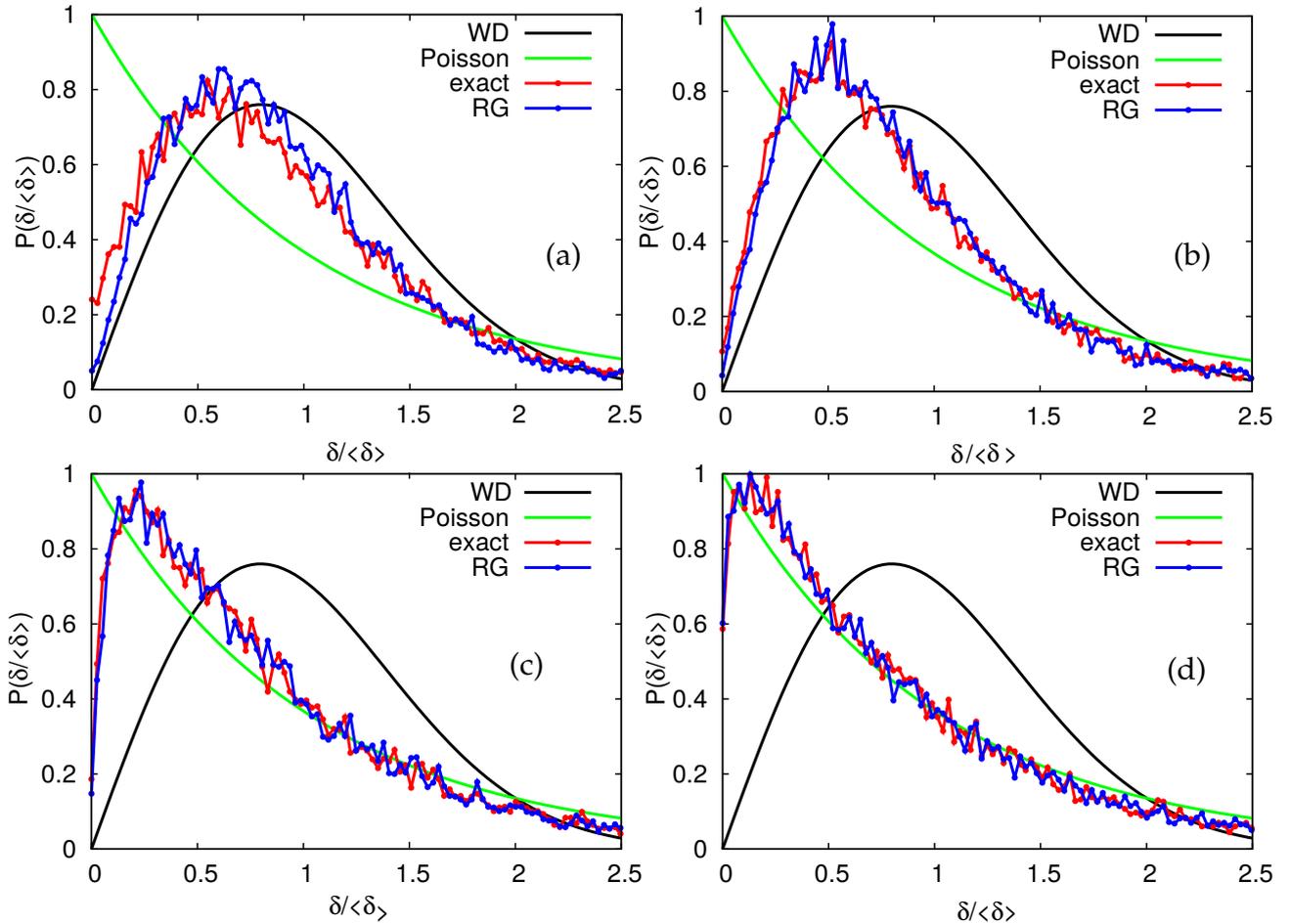


Figura 7.10: Estatística de níveis obtidas pelo grupo de renormalização (azul) e a comparação com diagonalização exata (vermelho). (a), (b), (c), (d) correspondem a expoentes  $\alpha = 0.7, 1, 2, 5$ . O sistema é composto de 100 sítios, e a média foi tomada sobre 20 realizações de desordem, para cada expoente. As curvas preta e verde são as distribuições de Wigner-Dyson e Poisson, características de sistemas delocalizados e localizados, respectivamente.

número de equações escalará exponencialmente com o tamanho do sistema. Se mostra, portanto, conveniente introduzir um esquema de grupo de renormalização que diminui substancialmente o trabalho de capturar, por exemplo, a estatística de níveis, indicador da fase do sistema. Além disso, o grupo de renormalização fornece o *espectro completo*, ao contrário da implementação de SDRG feita anteriormente. Este método de grupo de renormalização captura a física de  $\alpha > \frac{1}{2}$ , enquanto o uso das equações de fluxo fornecem a física correta em  $\alpha < \frac{1}{2}$ .

A generalização para sistemas interagentes se mostra muito promissora. Já que o método permite acessar todos os níveis de energia do sistema, equações de fluxo podem se mostrar ferramentas poderosas no estudo de localização em sistemas de muitos corpos, um tema em destaque nos últimos anos (ver Ref. [81] para uma revisão e o status atual desta área). Por serem sistemas ao mesmo tempo interagentes e desordenados, e pela necessidade de se conhecer o espectro todo, muito dos argumentos utilizados até o momento nesta área são qualitativos. Acreditamos que, se for possível uma implementação de grupo de renormalização acoplado às Equações de Fluxo, nos moldes feitos neste Capítulo, resultados mais quantitativos podem vir a ser acessados.

# Capítulo 8

## Conclusões

Estudamos, nesta Tese, classes de sistemas fortemente desordenados unidimensionais. Em particular, nos focamos em duas destas classes: cadeias de spin desordenadas e sistemas desordenados de férmions não-interagentes.

Para a primeira classe, desvendamos o mecanismo genérico que leva ao aparecimento de simetrias emergentes em sistemas de spin com desordem. Sucintamente, os multipletos fundamentais do problema local de dois spins deve se transformar como representação irredutível da simetria emergente. No caso da cadeia de spin 1 estudada no Capítulo 3, de simetria  $SU(2)$  com acoplamentos bilineares e biquadráticos, a simetria emergente é  $SU(3)$ .

A generalização para cadeias de spin  $S$  fortemente desordenadas, também simétricas por transformações  $SU(2)$ , foi feita no Capítulo 5, utilizando a linguagem de Tensores Esféricos Irredutíveis, introduzidos no Capítulo 4. Os pontos fixos antiferromagnéticos estáveis são aqueles onde somente Tensores Esféricos Irredutíveis de uma determinada ordem sobrevivem em baixas energias. Outros pontos fixos antiferromagnéticos surgem, onde singletos são formados por pares de spins, sendo o mais relevante destes pontos aquele com simetria  $SU(2S + 1)$ . Apesar de globalmente instável, a existência deste ponto garante que todas as fases antiferromagnéticas herdem sua simetria, pela conectividade do diagrama de fases. Fica evidente, ainda, que fases de singletos aleatórios com expoentes  $\psi < \frac{1}{2}$  devem ser diferenciadas de fases com simetria emergente. O expoente ser menor que meio é condição necessária para a emergência de simetria, mas não suficiente, conforme evidenciado pelo estudo da cadeia de spin 2. Mesmo para spins maiores (mas com valores inteiros), é relativamente simples obter  $\psi = \frac{1}{3}$ , mas a simetria em baixas energias se mantém  $SU(2)$ .

Da introdução de tensores de ordem maior, também é notório o fato de que a precisão dos passos de dizimação do SDRG é maior conforme maior a ordem do tensor, o que nos permite conjecturar que a desordem baixa é mais relevante conforme maior a ordem dos tensores através dos quais spins de diferentes sítios são acoplados.

Em cada Capítulo onde um determinado sistema foi estudado, indicamos possíveis extensões futuras, baseadas no conhecimento construído. A maior parte das questões que apareceram no Capítulo 3, onde estudamos a emergência de simetria em sistemas desordenados através do exemplo de cadeias de spin 1, foi respondida no Capítulo 5, através da generalização para sistemas de spin  $S$ . Nessas cadeias de spin  $S$  invariantes por rotações e reversão temporal, o fluxo do SDRG em subespaços do espaço de parâmetros onde a renormalização em primeira ordem de teoria de perturbação é nula permanece não elucidado. Tal anulamento não ocorre em cadeias de Heisenberg, e é uma característica nova, inerente ao problema onde mais acoplamentos são mantidos. Uma questão que se origina é se os pontos fixos associados apresentam estrutura familiar, com fases conhecidas de outros sistemas, ou uma física nova.

Outra questão que fica para trabalhos futuros é sobre o conjunto de subespaços onde a simetria é maior que  $SU(2)$ . A linha  $SO(5)$  das cadeias de spin  $\frac{3}{2}$  [67, 68] é um exemplo, mas será o único? O fluxo do SDRG talvez possa ser usado para a determinação dessas simetrias extras, nem sempre evidentes, a partir do estudo da dimensão do espaço para onde os acoplamentos fluem. Nos restringindo, por exemplo, a regras de dizimação de segunda ordem e a spin  $\frac{3}{2}$ , podem ser definidas duas variáveis “angulares” dadas pela razão de acoplamentos de tensores de ordem distinta. Quando a simetria  $SO(5)$  está presente, o fluxo fica restrito a uma linha, ou seja, sobre o plano definido pelas variáveis angulares, uma restrição extra aparece. No contrário do caso geral, por outro lado, o fluxo gera acoplamentos em uma região de dimensão dois sobre este plano de variáveis angulares. A linha  $SO(5)$ , de fato, foi encontrada levando em conta esta restrição de variáveis angulares. O desafio de encontrar um procedimento sistemático para determinar estes subespaços onde a simetria é maior que a simetria do Hamiltoniano, pelo redução do subespaço de fluxo do SDRG, fica para estudos futuros.

A outra classe de sistemas estudada por nós nesta Tese foi a de sistemas de férmions não interagentes, quando hoppings de longo alcance são introduzidos (Capítulo 8). Estes hoppings são variáveis aleatórias, cujo desvio padrão decai como uma lei de potência de expoente  $\alpha$ . O fato de que os hoppings são de longo alcance torna possível uma transição de fase, entre uma fase localizada e uma delocalizada, mesmo sendo o sistema unidimensional. O diagrama de fases, em função do expoente de decaimento  $\alpha$ , por nós revisitado, havia sido pioneiramente estudado por Merlin e colaboradores [39], através de técnicas de supersimetria. A nossa

análise se baseou na aplicação do método de Equações de Fluxo [77], introduzido no Capítulo 6, para sistemas desordenados. Conseguimos captar o diagrama de fases total, sendo a física de expoentes baixos elucidada pela aplicação direta das Equações de Fluxo, enquanto a física de expoentes altos foi analisada através de um procedimento de Grupo de Renormalização, que usa as Equações de Fluxo do sistema de três sítios como base. O caráter localizado ou delocalizado de determinada fase pode tanto ser inferido pela evolução da distribuição de acoplamentos, quanto por características dos autovalores do Hamiltoniano, através da medida de sua repulsão mútua.

A rota por nós traçada na generalização das Equações de Fluxo para sistemas desordenados é promissora no estudo de localização em sistemas de muitos corpos interagentes (ver Ref. [81] e demais referências lá incluídas), tópico muito atual em Matéria Condensada. A localização em sistemas de muitos corpos interagentes é evidenciada, por exemplo, pela violação da hipótese de termalização de autoestados (ETH, do inglês “*Eigenstate Thermalization Hypothesis*”). Portanto, ensembles convencionais de mecânica estatística não são capazes de capturar a física de tempos longos. Além do interesse teórico nestes sistemas, estes podem ser também úteis no contexto de armazenamento de informação quântica uma vez que, por não termalizarem, podem localmente armazenar informação sobre condições iniciais locais [81].

O fato de que *todo o espectro* é mantido pelas Equações de Fluxo, ao contrário da implementação canônica do SDRG introduzida no Capítulo 2, é o que pode vir a permitir o estudo da física desses sistemas, onde propriedades de todos os autovetores são necessárias. Para tanto, é necessário incluir no Hamiltoniano termos de interação, o que aumenta exponencialmente o número de equações a serem concomitantemente resolvidas. Acreditamos que o mais desejável seja usar novamente o sistema de Equações de Fluxo para motivar um procedimento de grupo de renormalização, assim como fizemos no caso sem interação.

# Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [2] D. S. Fisher. Random antiferromagnetic quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, 50:3799, 1 August 1994.
- [3] D. S. Fisher. Critical behavior of random transverse-field Ising spin chains. *Phys. Rev. B*, 51:6411, 1995.
- [4] D. S. Fisher. Random transverse field Ising spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 69:534, 1992.
- [5] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58:801–976, Oct 1986.
- [6] M. Á. Virasoro, M. Mézard, and G. Parisi. *Spin Glass Theory and Beyond*. World Scientific, 1987.
- [7] A. Crisanti. *Products of random matrices in statistical physics*. Springer Series in Solid-State Sciences, 1993.
- [8] I. Giardinà and C. Dominicis. *Random Fields and Spin Glasses: A Field Theory Approach*. Cambridge, 2006.
- [9] F. Iglói and C. Monthus. Strong disorder RG approach of random systems. *Phys. Rep.*, 412(5):277–431, 2005.
- [10] Jean-Philippe Bouchaud, Leticia F Cugliandolo, Jorge Kurchan, and Marc Mezard. Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems. *arXiv preprint cond-mat/9702070*, 1997.
- [11] Konstantin Efetov. *Supersymmetry in Disorder and Chaos*. Cambridge University Press, 1999.
- [12] S. k. Ma, C. Dasgupta, and C. k. Hu. Random Antiferromagnetic Chain. *Phys. Rev. Lett.*, 43:1434, 1979.
- [13] C. Dasgupta and S.-k. Ma. Low-temperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, 22:1305, 1980.
- [14] R. N. Bhatt and P. A. Lee. A scaling method for low temperature behavior of random antiferromagnetic systems. *J. Appl. Phys.*, 52:1703, 1981.
- [15] R. N. Bhatt and P. A. Lee. Scaling studies of highlydisordered Spin-1/2 antiferromagnetic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 48:344, 1982.
- [16] José A. Hoyos, André P. Vieira, N. Laflorencie, and E. Miranda. Correlation amplitude and entanglement entropy in random spin chains. *Phys. Rev. B*, 76:174425, Nov 2007.
- [17] R. B. Griffiths. Nonanalytic Behavior Above the Critical Point in a Random Ising Ferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 23:17, 1969.
- [18] Mohit Randeria, James P. Sethna, and Richard G. Palmer. Low-frequency relaxation in ising spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1321–1324, Mar 1985.
- [19] A. J. Bray. Nature of the griffiths phase. *Phys. Rev. Lett.*, 59:586–589, Aug 1987.
- [20] Kedar Damle and David A. Huse. Permutation-symmetric multicritical points in random antiferromagnetic spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 89:277203, Dec 2002.
- [21] José Abel Hoyos and E. Miranda. Random antiferromagnetic  $SU(n)$  spin chains. *Phys. Rev. B*, 70:180401, Nov 2004.
- [22] L. Fidkowski, H.-H. Lin, P. Titum, and G. Refael. Permutation-symmetric critical phases in disordered non-abelian anyonic chains. *Phys. Rev. B*, 79:155120, Apr 2009.

- [23] R. A. Hyman and K. Yang. Impurity Driven Phase Transition in the Antiferromagnetic Spin-1 Chain. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1783, 1997.
- [24] R. A. Hyman, Kun Yang, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin. Random bonds and topological stability in gapped quantum spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 76(5):839–842, Jan 1996.
- [25] Gil Refael, Stefan Kehrein, and Daniel S. Fisher. Spin reduction transition in spin- $\frac{3}{2}$  random heisenberg chains. *Phys. Rev. B*, 66:060402, Aug 2002.
- [26] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee. Low-energy fixed points of random quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, 55:12578, 1997.
- [27] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee. Random Quantum Spin Chains: A Real-Space Renormalization Group Study. *Phys. Rev. Lett.*, 75:4302, 1995.
- [28] E. Miranda and V. Dobrosavljević. Disorder-driven non-Fermi liquid behavior of correlated electrons. *Rep. Prog. Phys.*, 68:2337, 2005.
- [29] C. V. Ciobanu, S.-K. Yip, and Tin-Lun Ho. Phase diagrams of  $f = 2$  spinor bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 61:033607, Feb 2000.
- [30] C. D. Batista and G. Ortiz. Algebraic approach to interacting quantum systems. *Adv. Phys.*, 53(1):1, 2004.
- [31] J. Schmalian and C. Batista. Emergent symmetry and dimensional reduction at a quantum critical point. *Phys. Rev. B*, 77:094406, 2008.
- [32] V. L. Quito, José A. Hoyos, and E. Miranda. Emergent SU(3) symmetry in random spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 115:167201, Oct 2015.
- [33] Ferdinand Evers and Alexander D. Mirlin. Anderson transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1355–1417, Oct 2008.
- [34] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42:673–676, Mar 1979.
- [35] Yoav Lahini, Assaf Avidan, Francesca Pozzi, Marc Sorel, Roberto Morandotti, Demetrios N. Christodoulides, and Yaron Silberberg. Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 100:013906, Jan 2008.
- [36] Martin Störzer, Peter Gross, Christof M. Aegerter, and Georg Maret. Observation of the critical regime near anderson localization of light. *Phys. Rev. Lett.*, 96:063904, Feb 2006.
- [37] Eugene P. Wigner. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *Annals of Mathematics*, 62(3):548–564, 1955.
- [38] A. Boutet de Monvel, L. Pastur, and M. Shcherbina. On the statistical mechanics approach in the random matrix theory: Integrated density of states. *Journal of Statistical Physics*, 79(3-4):585–611, 1995.
- [39] Alexander D. Mirlin, Yan V. Fyodorov, Frank-Michael Dittes, Javier Quezada, and Thomas H. Seligman. Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices. *Phys. Rev. E*, 54:3221–3230, Oct 1996.
- [40] David Pekker, Gil Refael, Ehud Altman, Eugene Demler, and Vadim Oganesyan. Hilbert-glass transition: New universality of temperature-tuned many-body dynamical quantum criticality. *Phys. Rev. X*, 4:011052, Mar 2014.
- [41] T.-P. Cheng and L.-F. Li. *Gauge Theory of Elementary Particle Physics*. Oxford, 1988.
- [42] P. W. Anderson. *Basic Notions of Condensed Matter Physics*. Benjamin-Cummings, Melon-Park, California, 1984.
- [43] A. B. Zamolodchikov. Integrals of motion and s-matrix of the (scaled) t=tc ising model with a magnetic field. *Int. J. Mod. Phys. A*, 4:4235, 1989.
- [44] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer. Quantum criticality in an ising chain: Experimental evidence for emergent e8 symmetry. *Science*, 327:177, 2010.
- [45] T. Senthil, Ashvin Vishwanath, Leon Balents, Subir Sachdev, and Matthew P. A. Fisher. Deconfined quantum critical points. *Science*, 303:1490, 2004.

- [46] Tarun Grover, D. N. Sheng, and Ashvin Vishwanath. Emergent space-time supersymmetry at the boundary of a topological phase. *Science*, 344:280, 2014.
- [47] Hsiu-Hau Lin, Leon Balents, and Matthew P. A. Fisher. Exact  $so(8)$  symmetry in the weakly-interacting two-leg ladder. *Phys. Rev. B*, 58:1794, 1998.
- [48] P. Chen, Z.-L. Xue, I. P. McCulloch, M.-C. Chung, C.-C. Huang, and S.-K. Yip. Quantum critical spin-2 chain with emergent  $su(3)$  symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 114:145301, 2015.
- [49] Erez Zohar, J Ignacio Cirac, and Benni Reznik. Quantum simulations of lattice gauge theories using ultracold atoms in optical lattices. *arXiv:1503.02312*, 2015.
- [50] Adilet Imambekov, Mikhail Lukin, and Eugene Demler. Spin-exchange interactions of spin-one bosons in optical lattices: Singlet, nematic, and dimerized phases. *Phys. Rev. A*, 68:063602, 2003.
- [51] J. J. García-Ripoll, M. A. Martin-Delgado, and J. I. Cirac. Implementation of spin hamiltonians in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 93:250405, 2004.
- [52] Salvatore R. Manmana, Andreas M. Läuchli, Fabian H. L. Essler, and Frédéric Mila. Phase diagram and continuous pair-unbinding transition of the bilinear-biquadratic  $s = 1$  heisenberg chain in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 83:184433, May 2011.
- [53] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 59:799–802, Aug 1987.
- [54] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1996.
- [55] Kun Yang and R. N. Bhatt. Generation of large moments in a spin-1 chain with random antiferromagnetic couplings. *Phys. Rev. Lett.*, 80:4562, May 1998.
- [56] Beatriz Boechat, Andreia Saguia, and Mucio A. Continentino. Random spin-1 quantum chains. *Solid State Commun.*, 98(5):411–416, 1996.
- [57] C. Monthus, O. Golinelli, and Th. Jolicoeur. Percolation transition in the random antiferromagnetic spin-1 chain. *Phys. Rev. Lett.*, 79:3254, 1997.
- [58] C. Monthus, O. Golinelli, and Th. Jolicoeur. Phases of random antiferromagnetic spin-1 chains. *Phys. Rev. B*, 58:805, 1998.
- [59] Andreia Saguia, Beatriz Boechat, and Mucio A. Continentino. Phase diagram of the random heisenberg antiferromagnetic spin-1 chain. *Phys. Rev. Lett.*, 89:117202, Aug 2002.
- [60] K. Yang, R. A. Hyman, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin. Effects of randomness in gapped antiferromagnetic quantum spin chains. *J. Appl. Phys.*, 79(8):5096, 1996.
- [61] R. G. Pereira. private communication.
- [62] Kedar Damle. Griffiths effects in random heisenberg antiferromagnetic  $s = 1$  chains. *Phys. Rev. B*, 66:104425, Sep 2002.
- [63] Sara Bergkvist, Patrik Henelius, and Anders Rosengren. Ground state of the random-bond spin-1 heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 66(13):134407, Oct 2002.
- [64] X. Chen, Z.-C. Gu, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen. Symmetry-protected topological orders in interacting bosonic systems. *Science*, 338:6114, 2012.
- [65] José A. Hoyos. Weakly disordered absorbing-state phase transitions. *Phys. Rev. E*, 78:032101, Sep 2008.
- [66] V. L. Quito, J. A. Hoyos, and E. Miranda. Random  $SU(2)$ -symmetric spin- $S$  chains. *arXiv preprint cond-mat/1512.04542*, 2015.
- [67] Congjun Wu, Jiang-ping Hu, and Shou-cheng Zhang. Exact  $so(5)$  symmetry in the spin-3/2 fermionic system. *Phys. Rev. Lett.*, 91:186402, 2003.
- [68] Congjun Wu. Hidden symmetry and quantum phases in spin-3/2 cold atomic systems. *Modern Physics Letters B*, 20(27):1707–1738, 2006.
- [69] M. A. Cazalilla, A. F. Ho, and M. Ueda. Ultracold gases of ytterbium: ferromagnetism and mott states in an  $su(6)$  fermi system. *New J. Phys.*, 11:103033, 2009.

- [70] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey. Two-orbital  $su(n)$  magnetism with ultracold alkaline-earth atoms. *Nature Phys.*, 6:289, 2010.
- [71] X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, A. M. Rey, and J. Ye. Spectroscopic observation of  $su(n)$ -symmetric interactions in sr orbital magnetism. *Science*, 345:1467, 2014.
- [72] F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. S. Fölling. Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold  $su(n)$ - symmetric fermions. *Nature Phys.*, 10:779, 2014.
- [73] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi. An  $su(6)$  mott insulator of an atomic fermi gas realized by large-spin pomeranchuk cooling. *Nature Phys.*, 8:825, 2012.
- [74] A. Saguia, B. Boechat, and M. A. Continentino. Spin- $\frac{3}{2}$  random quantum antiferromagnetic chains. *Phys. Rev. B*, 68:020403, Jul 2003.
- [75] Enrico Carlon, Péter Lajkó, Heiko Rieger, and Ferenc Iglói. Disorder-induced phases in higher-spin anti-ferromagnetic heisenberg chains. *Phys. Rev. B*, 69:144416, Apr 2004.
- [76] H.F Jones. *Groups, Representations and Physics*. CRC Press, 1998.
- [77] Franz Wegner. Flow-equations for hamiltonians. *Ann. Physik*, 3(77), 1994.
- [78] Stanisław D. Głazek and Kenneth G. Wilson. Renormalization of hamiltonians. *Phys. Rev. D*, 48:5863–5872, Dec 1993.
- [79] Stanislaw D. Glazek and Kenneth G. Wilson. Perturbative renormalization group for hamiltonians. *Phys. Rev. D*, 49:4214–4218, Apr 1994.
- [80] Stefan Kehrein. *The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [81] Rahul Nandkishore and David A. Huse. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 6(1):15–38, 2015.
- [82] L. S. Levitov. Absence of localization of vibrational modes due to dipole-dipole interaction. *EPL (Europhysics Letters)*, 9(1):83, 1989.
- [83] L. S. Levitov. Delocalization of vibrational modes caused by electric dipole interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 64:547–550, Jan 1990.
- [84] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, Jul 1997.
- [85] VE Kravtsov. Random matrix theory: Wigner-dyson statistics and beyond.(lecture notes of a course given at sissa (trieste, italy)). *arXiv preprint arXiv:0911.0639*, 2009.
- [86] H. Javan Mard, José A. Hoyos, E. Miranda, and V. Dobrosavljević. Strong-disorder renormalization-group study of the one-dimensional tight-binding model. *Phys. Rev. B*, 90:125141, Sep 2014.
- [87] David Griffiths. *Introduction to Elementary Particles*. John Wiley & Sons Inc, 1987.
- [88] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Frank Laloe. *Quantum Mechanics, Vol. 2*. Wiley, 1st edition, 1991.

# Apêndice A

## Regras de dizimação para cadeias de Heisenberg de spin $S$

Neste Apêndice, vamos calcular as regras de dizimação de cadeias de spins  $S$  com acoplamentos de Heisenberg. Estas regras são citadas no Capítulo 2 e representam um caso particular do Hamiltoniano do Capítulo 5. Como a demonstração do caso com somente termos de Heisenberg é bem mais simples do que aquela que fazemos no Capítulo 5, preferimos explicitá-la aqui.

Começamos com o Hamiltoniano do problema de 4 spins

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (\text{A.1})$$

sendo

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{2,3} = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4} = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 \quad (\text{A.3})$$

e com a consideração que  $J_2 \gg J_1, J_3$ , o que permite tratar  $\mathcal{H}_1$  como perturbação de  $\mathcal{H}_0$ .

Vamos considerar dois casos: quando  $J_2$  é positivo e quando  $J_2$  é negativo.

### A.1 Dizimação de singletos

Se  $J_2 > 0$ , o estado fundamental de  $\mathcal{H}_0$  é um singlete e primeira correção perturbativa não-nula é de segunda ordem, dada por

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = P_0 (\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}) \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}} \tilde{P} (\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}) P_0, \quad (\text{A.4})$$

onde  $P_0 = |0, 0\rangle \langle 0, 0|$  é o projetor no estado de singlete dos sítios 2 e 3,  $|J, M\rangle = |0, 0\rangle$ , e  $\tilde{P} = 1 - P_0$ . Além disso,  $E_0 = -J_2 S(S+1)$  é a energia do estado de singlete.

Vamos nos focar em um dos termos da Eq. (A.4), que será responsável por conectar spins dos sítios 1 e 4

$$\mathcal{V}_{1,4}^{(2)} = P_0 \mathcal{H}_{1,2} \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}} \tilde{P} \mathcal{H}_{3,4} P_0. \quad (\text{A.5})$$

Calculando explicitamente  $P_0 \mathcal{H}_{1,2} \tilde{P}$ , temos

$$P_0 \mathcal{H}_{1,2} \tilde{P} = |0, 0\rangle \langle 00 | S_{1a} S_{2a} | JM \rangle \langle JM | S_{3b} S_{4b} | 00 \rangle \langle 0, 0|, \quad (\text{A.6})$$

$$= S_{1a} S_{4b} |0, 0\rangle \langle 0, 0| \langle 00 | S_{2a} | JM \rangle \langle JM | S_{3b} | 00 \rangle. \quad (\text{A.7})$$

As componentes  $S_{2a}$  e  $S_{3b}$  de spins são operadores vetoriais, o que significa, pelo Teorema de Wigner-Eckart (Eq. (4.30) do texto principal) que, por exemplo, o elemento de matriz  $\langle 00 | S_{2a} | JM \rangle$  é não-nulo somente se  $J = 1$ . Este fato simplifica dramaticamente a soma. Ficamos com

$$\mathcal{V}_{1,4}^{(2)} = S_{1a} S_{4b} |0, 0\rangle \langle 0, 0| \sum_{M=-1}^1 \frac{\langle 00 | S_{2a} | 1M \rangle \langle 1M | S_{3b} | 00 \rangle}{E_0 - E_1}, \quad (\text{A.8})$$

onde  $E_1$  é a energia do estado de momento angular total  $J = 1$  e o denominador de energia é  $E_0 - E_1 = -J_2$ . Com isso,

$$\mathcal{V}_{1,4}^{(2)} = \frac{S_{1a}S_{4b}}{-J_2} |0, 0\rangle \langle 00 | S_{2a}S_{3b} | 00\rangle \langle 0, 0|. \quad (\text{A.9})$$

Definimos os seguintes operadores tensoriais de ordem bem definidas (ver Capítulo 4)

$$Y_0 = \frac{1}{3} \delta_{a,b} S_{2a} S_{3a}, \quad (\text{A.10})$$

$$Y_1 = \frac{1}{2} (S_{2a} S_{3a} - S_{3a} S_{2a}), \quad (\text{A.11})$$

$$Y_2 = \frac{1}{2} (S_{2a} S_{3a} + S_{3a} S_{2a}) - \frac{1}{3} \delta_{a,b} S_{2a} S_{3a}, \quad (\text{A.12})$$

temos que o termo  $S_{2a}S_{3b}$  pode ser escrito como

$$S_{2a}S_{3b} = Y_0 + Y_1 + Y_2. \quad (\text{A.13})$$

Somente o termo  $Y_0$  contribui para a Eq. (A.9), por se tratar de um operador escalar (novamente, detalhes no Capítulo 4). Com isso, chegamos a

$$\mathcal{V}_{1,4}^{(2)} = \frac{S(S+1)}{3J_2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 |0, 0\rangle \langle 0, 0|. \quad (\text{A.14})$$

Ou seja, restritos no subespaço onde  $S_2$  e  $S_3$  formam um singlete (o que é justificado se a temperatura for baixa o suficiente para que os outros multipletos não sejam acessíveis), em segunda ordem de teoria de perturbação encontramos um acoplamento efetivo entre os spins  $S_1$  e  $S_4$  dado por

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,4}^{(2)} = \tilde{J}_{1,4} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4, \quad (\text{A.15})$$

sendo  $\tilde{J}_{1,4} = \frac{2S(S+1)}{3J_2}$ . O fator adicional de 2 de  $\tilde{J}_{1,4}$  vem da soma com a contribuição do complexo conjugado da Eq. (A.5).

## A.2 Dizimação no caso de momento angular finito

Caso  $J_2 < 0$  ou  $J_2 > 0$  e  $S_2 \neq S_3$ , o spin total  $\tilde{S}$  do estado fundamental do par de spins será não-nulo e o tratamento é feito em primeira ordem de teoria de perturbação. Para a cadeia de Heisenberg, sempre o valor do spin do multiplete fundamental é  $\tilde{S} = S_2 + S_3$  ( $J_2 < 0$ ) ou  $\tilde{S} = |S_2 - S_3|$  ( $J_2 > 0$ ). Em primeira ordem de teoria de perturbação, temos que a renormalização é obtida pela projecção da perturbação  $\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}$  no multiplete fundamental

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,2}^{(1)} = P_{\tilde{S}} (\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4}) P_{\tilde{S}}, \quad (\text{A.16})$$

$$= J_1 \mathbf{S}_1 \cdot (P_{\tilde{S}} \mathbf{S}_2 P_{\tilde{S}}) + J_3 (P_{\tilde{S}} \mathbf{S}_3 P_{\tilde{S}}) \cdot \mathbf{S}_4. \quad (\text{A.17})$$

Para continuarmos o cálculo, é conveniente usarmos o Teorema da Projecção, que é uma manifestação do Teorema de Wigner-Eckart (Eq. (4.30) do texto principal) para o caso específico de operadores vetoriais [54]. O teorema da projecção diz que qualquer operador vetorial é proporcional ao operador de momento angular total, em um subespaço onde todos os outros números quânticos são mantidos constantes. Colocando também a constante de projecção, ficamos com

$$\mathbf{S}_{2,3} = \frac{\tilde{S}(\tilde{S}+1) \pm S_2(S_2+1) \mp S_3(S_3+1)}{2\tilde{S}(\tilde{S}+1)} \tilde{\mathbf{S}}. \quad (\text{A.18})$$

Com o uso da equação acima, a cálculo de (A.17) se torna trivial, e resulta em

$$\tilde{\mathcal{H}}_{1,2}^{(1)} = \tilde{J}_1 \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \tilde{J}_3 \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{S}_4, \quad (\text{A.19})$$

onde

$$\tilde{J}_1 = \frac{\tilde{S}(\tilde{S}+1) + S_2(S_2+1) - S_3(S_3+1)}{2\tilde{S}(\tilde{S}+1)} J_1, \quad (\text{A.20})$$

$$\tilde{J}_3 = \frac{\tilde{S}(\tilde{S}+1) - S_2(S_2+1) + S_3(S_3+1)}{2\tilde{S}(\tilde{S}+1)} J_3. \quad (\text{A.21})$$

Em suma, o passo de dizimação neste caso consiste em substituir o par de spins  $S_2$  e  $S_3$  por um spin efetivo  $\tilde{S}$ , ao mesmo tempo que os acoplamentos vizinhos  $J_1$  e  $J_3$  são alterados de acordo com as Eqs. (A.20) e (A.21).

# Apêndice B

## Introdução ao grupo SU(N)

Neste Apêndice, introduzimos o grupo SU(N). Trata-se do grupo das matrizes unitárias  $N \times N$  cujo determinante é igual a unidade. Equivalentemente, se  $U$  é uma matriz pertencente ao grupo, então  $UU^\dagger = \mathbf{1}$  e  $\det U = 1$ . Qualquer matriz que satisfaça essas propriedades pode ser escrita como  $U = \exp(i\Lambda)$ , sendo  $\Lambda$  hermitiana e com traço nulo. O conjunto de matrizes  $\Lambda$  linearmente independentes satisfazendo essa propriedade é formado por  $N^2 - 1$  matrizes, chamadas de *geradoras* de SU(N). Um elemento do grupo SU(N) pode, portanto, ser escrito como

$$U = \exp\left(i \sum_{a=1}^{N^2-1} c_a \Lambda^{(a)}\right), \quad (\text{B.1})$$

onde a coleção de  $c_a$ 's é de números reais, chamados de parâmetros do grupo. O conjunto de matrizes  $\Lambda$  pode ser escolhido, uma vez que o traço quadrado, que corresponde à normalização, for fixado. A escolha que seguiremos [76] é

$$\text{Tr}\left(\Lambda^{(a)}\Lambda^{(b)}\right) = 2\delta^{a,b}. \quad (\text{B.2})$$

A representação fundamental do grupo SU(N) é composta da coleção de matrizes  $U$  formadas a partir da Eq. (B.1). Na linguagem de tabelas de Young, a representação fundamental do grupo é representada por uma caixa,

$$U \rightarrow \square$$

Para mais detalhes sobre tabelas de Young, ver Ref. [76]. Antes de destacarmos o grupo SU(3), de maior interesse nesta Tese, falaremos do grupo SU(2), por este ser mais simples e familiar.

### B.1 O grupo SU(2)

Para o grupo SU(2), os 3 geradores  $\Lambda^{(a)}$  podem ser escolhidos como sendo as matrizes de Pauli  $\sigma^{(a)}$ . Os spins maiores aparecem a partir da soma de spins menores. O spin igual a 1, por exemplo, origina-se do multipletto simétrico da soma de spins  $\frac{1}{2}$  que, na linguagem de tabelas de Young, corresponde a duas caixas concatenadas horizontalmente. A representação da série de Clebsch-Gordan do grupo, quando a escolhermos a representação fundamental (de spin  $\frac{1}{2}$ ) em cada sítio, está ilustrada na Figura B.1.

Além disso, o singleto de SU(2) é o estado antissimétrico representado por duas caixas verticalmente concatenadas. De maneira geral, o estado de singleto, em SU(N), corresponde a  $N$  caixas verticais concatenadas. Equivalentemente, o singleto é o estado totalmente antissimétrico nos  $N$  índices.

$$\begin{array}{c} \square \otimes \square = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \\ S = \frac{1}{2} \quad S = \frac{1}{2} \quad S = 0 \quad S = 1 \end{array}$$

Figura B.1: Série de Clebsch-Gordan de SU(2), do produto de duas representações fundamentais.

$$\begin{array}{l}
 1) \quad \square \otimes \square = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \quad 3) \quad \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \square \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \\
 2) \quad \square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \mathbf{1} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}
 \end{array}$$

Figura B.2: Séries de Clebsch-Gordan para o grupo SU(3), com as três combinações distintas de duas representações. Uma caixa corresponde à representação fundamental, enquanto duas caixas concatenadas verticalmente formam a representação anti-fundamental. O estado de singleto formado em 2) representa os mésons, na linguagem de física de partículas, onde o singleto é chamado de “singleto de cor”, associado ao número quântico de cor. Em 1) e 3), estágios intermediários na formação de bárions (ver Apêndice C para uma introdução à física de partículas necessária).

Em SU(2), a dimensão das representações é aquela obtida pela soma usual de momento angular. O tripleto tem dimensão três, enquanto o singleto tem dimensão 1. De maneira geral, qualquer que seja a ordem  $N$  do grupo, o singleto terá dimensão 1, afinal, só há uma maneira de antissimetrizar  $N$  índices distintos.

O problema de dois spins associado ao grupo SU(2) é dado pelo produto escalar dos geradores do grupo,

$$\mathcal{H}_i = J_i \sum_{a=1}^3 \Lambda_i^{(a)} \cdot \Lambda_{i+1}^{(a)} = J_i \sum_{a=1}^3 \sigma_i^{(a)} \cdot \sigma_{i+1}^{(a)}. \quad (\text{B.3})$$

Os autovalores, que neste caso de SU(2) são os autovalores usuais de momento angular total, são os chamados Casimir do grupo. Para  $N > 2$  um Hamiltoniano invariante por transformações do grupo pode ser também escrito em termos de outras representações, como ficará evidente na sequência.

## B.2 O grupo SU(3)

Passamos agora aos possíveis Hamiltonianos de spin invariantes por transformações do grupo SU(3). As séries de Clebsch-Gordan do grupo, para várias representações, estão listadas na Fig. B.2.

1) Produto de representações fundamentais

O Hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_{ff} = J_i \sum_{a=1}^8 \Lambda_i^{(a)} \cdot \Lambda_{i+1}^{(a)}, \quad (\text{B.4})$$

com  $\Lambda$  sendo o conjunto de 8 ( $= 3^2 - 1$ ) geradores da representação fundamental de SU(3). Este conjunto de matrizes foi formado no Capítulo 3, em termos de operadores de spin 1.

2) Produto de representação fundamental e anti-fundamental

Aqui,

$$\mathcal{H}_{f\bar{f}} = J_i \sum_{a=1}^3 \Lambda_i^{(a)} \cdot \tilde{\Lambda}_{i+1}^{(a)}, \quad (\text{B.5})$$

sendo  $\tilde{\Lambda}$  a representação anti-fundamental, cujo número de geradores é o mesmo que da representação fundamental. O estado fundamental quando  $J > 0$  é um singleto, enquanto os outros 8 níveis têm energia maior, todas com o mesmo valor.

3) Produto de representações anti-fundamentais

O Hamiltoniano passa a ser

$$\mathcal{H}_{\bar{f}\bar{f}} = J_i \sum_{a=1}^3 \tilde{\Lambda}_i^{(a)} \cdot \tilde{\Lambda}_{i+1}^{(a)}, \quad (\text{B.6})$$

com o mesmo espectro do caso em que a representação fundamental é escolhida em cada sítio.

Destacamos também, na Fig. B.3, a série de Clebsch-Gordan de três representações fundamentais multiplicadas. O singleto formado corresponde, em física de partículas, a um bárion.

$$\begin{aligned}
 \square \otimes \square \otimes \square &= \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \right) \otimes \square \\
 &= \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \square \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \square \\
 &= \mathbf{1} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}
 \end{aligned}$$

Figura B.3: Série de Clebsch-Gordan do produto de três representações fundamentais. O estado de singlete formado da combinação de três representações fundamentais, na física de partículas, corresponde à formação de um bárion (ver Apêndice C).

### B.3 O grupo $SO(5)$ e o grupo $SU(4)$

Passamos agora ao grupo  $SO(5)$ , subgrupo de  $SU(4)$ . Esta análise detalhada do grupo  $SO(5)$  é justificada por este grupo aparecer no estudo da cadeia de spin  $\frac{3}{2}$  feito no Capítulo 5. Os resultados aqui expostos são uma versão condensada daquilo feito na Ref. [67], traduzido para a linguagem de Tensores Esféricos Irredutíveis.

Começamos com a construção dos operadores que se comportam como vetores de  $SO(5)$  sob rotações. Estes são combinações lineares de tensores  $SU(2)$  de ordem 2, formados por operadores de spin  $\frac{3}{2}$ :

$$n_i^{(1)} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{5}} (Y_{2,-2}(\mathbf{S}_i) + Y_{2,2}(\mathbf{S}_i)), \quad (\text{B.7})$$

$$n_i^{(2)} = -\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{5}} i (Y_{2,-2}(\mathbf{S}_i) - Y_{2,2}(\mathbf{S}_i)), \quad (\text{B.8})$$

$$n_i^{(3)} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{5}} i (Y_{2,-1}(\mathbf{S}_i) + Y_{2,1}(\mathbf{S}_i)), \quad (\text{B.9})$$

$$n_i^{(4)} = -\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{5}} (Y_{2,-1}(\mathbf{S}_i) - Y_{2,1}(\mathbf{S}_i)), \quad (\text{B.10})$$

$$n_i^{(5)} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{5}} Y_{2,0}(\mathbf{S}_i). \quad (\text{B.11})$$

Os operadores acima satisfazem a relação de anti-comutação  $\{n_i^{(a)}, n_i^{(b)}\} = 2\delta^{a,b}$ . Escrevendo as matrizes explicitamente, chegamos a

$$n_i^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad n_i^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & iI \\ -iI & 0 \end{pmatrix}, \quad n_i^{(3,4,5)} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

sendo  $I$  a matriz identidade  $2 \times 2$  e  $\boldsymbol{\sigma}$  as matrizes de Pauli.

Os operadores de ordem 2 de  $SO(5)$  são encontrados a partir do comutador de operadores vetoriais

$$L^{(a,b)} = -\frac{1}{2} i [n_i^{(a)}, n_i^{(b)}], \quad 1 \leq a < b \leq 5. \quad (\text{B.13})$$

São 11 operadores linearmente independentes  $L^{(a,b)}$ , que podem ser decompostos em termos de operadores de spin  $\frac{3}{2}$  de ordem 1 e ordem 3 em  $SU(2)$ . Por exemplo,

$$L^{(1,2)} = -\frac{8}{5} \sqrt{\frac{\pi}{3}} Y_{1,0}(\mathbf{S}_i) + \frac{8}{15} \sqrt{\frac{\pi}{7}} Y_{3,0}(\mathbf{S}_i).$$

O Hamiltoniano mais geral invariante por  $SO(5)$  que podemos construir consiste de uma combinação linear do escalar de  $SO(5)$  (operador identidade), mais os 5 vetores e os 11 objetos tensoriais de ordem 2, isto é,

$$\mathcal{H}_{SO(5)} = \sum_{i=1}^{N_{\text{sites}}} \left( J_i^{(s)} + J_i^{(n)} \sum_{a=1}^5 n_i^{(a)} n_{i+1}^{(a)} + J_i^{(L)} \sum_{a,b} L_i^{(a,b)} L_{i+1}^{(a,b)} \right), \quad (\text{B.14})$$

sendo  $J_i^{(s)}$ ,  $J_i^{(L)}$  e  $J_i^{(n)}$  constantes arbitrárias no sítio  $i$ . Uma vez construído o Hamiltoniano acima, um passo que se mostra conveniente é o mapeamento em termos de projetores. O resultado final é que somente projetores

em *múltiplos pares* estão presentes, o que torna o problema atrativo do ponto de vista experimental (ver o texto do Capítulo 5 para detalhes).

Os geradores da representação fundamental do grupo  $SU(4)$ , do qual  $SU(5)$  é subgrupo, podem ser encontrados colecionando o conjunto de 15 operadores  $\Lambda_i^{(a)} = \{L_i^{ab}, n_i^a\}$ . O Hamiltoniano com a representação fundamental de  $SU(4)$  em cada sítio é

$$\mathcal{H}_{SU(4)b} = \sum_i R_i \left( \sum_{a,b} L_i^{ab} L_{i+1}^{ab} + \sum_{a=1}^5 n_i^a n_{i+1}^a \right), \quad (\text{B.15})$$

$$= \sum_i \frac{16\pi}{15} R_i \left( \hat{O}_1(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) + \frac{1}{3} \hat{O}_2(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) + \frac{4}{21} \hat{O}_3(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) \right), \quad (\text{B.16})$$

$$= \sum_i R_i \sum_{a=1}^{15} \Lambda_i^{(a)} \Lambda_{i+1}^{(a)}. \quad (\text{B.17})$$

A notação usada na Eq. (B.16) foi introduzida no texto principal, Capítulo 5. A representação anti-fundamental de  $SU(4)$  tem como geradores o conjunto  $\tilde{\Lambda}_i^{(a)} = \{L_i^{ab}, -n_i^a\}$ . Disso, encontramos

$$\mathcal{H}_{SU(4)a} = \sum_i \tilde{R}_i \left( \sum_{a,b} \tilde{L}_i^{ab} L_{i+1}^{ab} + \sum_{a=1}^5 \tilde{n}_i^a n_{i+1}^a \right), \quad (\text{B.18})$$

$$= \sum_i \tilde{R}_i \left( \sum_{a,b} L_i^{ab} L_{i+1}^{ab} - \sum_{a=1}^5 n_i^a n_{i+1}^a \right), \quad (\text{B.19})$$

$$= \sum_i \frac{16\pi}{15} \tilde{R}_i \left( \hat{O}_1(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) - \frac{1}{3} \hat{O}_2(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) + \frac{4}{21} \hat{O}_3(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) \right), \quad (\text{B.20})$$

$$= \sum_i \tilde{R}_i \sum_{a=1}^{15} \Lambda_i^{(a)} \tilde{\Lambda}_{i+1}^{(a)}. \quad (\text{B.21})$$

# Apêndice C

## Física de Partículas: Breve Introdução

Neste Apêndice, fazemos uma breve introdução à Física de Partículas, especialmente a hádrons, já que estes são usados na analogia com excitações da cadeia de spin 1 desordenada estudada no Capítulo 3. Esta breve introdução será baseada em conteúdo apresentado na Ref. [87].

Até o início da década de 1960, o número de partículas elementares conhecidas seguia aumentando. O que se sabia era que as partículas encontradas podiam ser divididas em duas grandes classes: os hádrons (como prótons e nêutrons), que sofriam efeitos da força forte, e os léptons (como elétrons), que não eram influenciados por tal força. Porém, não existia uma maneira sistemática de classificar todas as partículas descobertas, tampouco de prever novas partículas.

A tabela periódica dos elementos químicos permitiu uma classificação sistemática dos elementos, assim como a possibilidade de prever elementos até então desconhecidos. O princípio da exclusão de Pauli e, de maneira mais ampla, a mecânica quântica, foram os ingredientes que possibilitaram esse entendimento mais profundo. Haveria algo análogo para a tabela periódica das partículas elementares? A resposta é positiva, conforme mostrado por Gell-Mann, e envolve a formação de hádrons por quarks.

### C.1 Os quarks

São seis os quarks descobertos:  $d$ ,  $u$ ,  $s$ ,  $c$ ,  $b$  e  $t$ , (abreviações de *down*, *up*, *strange*, *charm*, *bottom* e *top*), todos com caráter fermiônico, spin  $\frac{1}{2}$  e carga fracionária, igual a  $\frac{1}{3}$  ou  $\frac{2}{3}$  do módulo da carga elementar, dependendo do quark. De acordo com a cromodinâmica quântica, os quarks possuem também uma propriedade chamada *cor*, arbitrariamente rotulada com números quânticos *azul*, *verde* e *vermelho*. Associado a cada quark existe um antiquark com números quânticos contrários.

Os quarks se combinam para formar todos os *hádrons*, que podem ser separados em duas grandes classes, os mésons e bárions. Em comum nas duas classes é que as partículas devem ser *singletos de cor de SU(3)*. Voltaremos a este ponto mais tarde neste Apêndice.

### C.2 Mésons

Os mésons são partículas hadrônicas compostas por um quark e um antiquark, unidos pela força forte. Os mésons são bósons, com seu spin assumindo valores inteiros. Exemplos familiares de mésons são os píons e os kaons. Todos os mésons são instáveis, sendo que os mésons carregados eletricamente decaem para formar elétrons e neutrinos, enquanto os mésons sem carga elétrica decaem para formar fótons. Os mésons sem carga participam das interações fortes e fracas, enquanto os mésons carregados sofrem também os efeitos da força eletromagnética. Todos os mésons possuem suas próprias anti-partículas.

### C.3 Bárions

Os bárions são formados por três quarks e são, portanto, férmions, de spin semi-inteiro. Assim como os mésons, são unidos pela força forte. Os exemplos mais conhecidos de bárions são o próton e o nêutron. Cada bárion tem um anti-bárion associado, nos quais os quarks são substituídos por anti-quarks, e vice-versa.

### C.4 Relação com o grupo SU(3)

Associada ao número quântico da cor existe uma *simetria de gauge SU(3)*. Vamos entender melhor o que isto quer dizer. Chamemos de  $f_B$ ,  $f_G$  e  $f_R$  as componentes de cores associadas a um quark. O vetor de três

componentes

$$f = \begin{pmatrix} f_B \\ f_G \\ f_R \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

se transforma de acordo com a representação fundamental de  $SU(3)$  (ver Apêndice B para introdução ao  $SU(3)$ ). Analogamente, os anti-quarks são compostos de acordo com

$$\bar{f} = \begin{pmatrix} \bar{f}_B \\ \bar{f}_G \\ \bar{f}_R \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Todas as partículas livres observadas na natureza são *singletos de cor* (ou singletos de  $SU(3)$ ), o que inclui ambos mésons e bárions. Os mésons são singletos de pares de quark e anti-quark, da forma

$$|\text{mésons}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (f_R \bar{f}_R + f_B \bar{f}_B + f_R \bar{f}_R), \quad (\text{C.3})$$

sendo, portanto, simétricos na troca de índice de cores (ver Fig. B.2 do Apêndice B).

Por outro lado, os bárions, formados de singletos de 3 quarks, são do tipo

$$|\text{bárions}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (f_R f_B f_G - f_B f_R f_G + f_B f_G f_R - f_G f_B f_R + f_G f_R f_B - f_R f_G f_B), \quad (\text{C.4})$$

antissimétricos pela troca de índices de cor (ver Fig. B.3 do Apêndice B).

## Apêndice D

# Demonstração de que $\hat{O}_J$ é um operador escalar

Neste Apêndice, mostraremos que os objetos definidos na Eq. 4.11 são, de fato, invariantes por rotação.

É simples ver que  $[S_i^z + S_{i+1}^z, \hat{O}_J] = 0$  usando que  $[S_i^z, Y_{J,M}(\mathbf{S}_j)] = M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) \delta_{i,j}$ . Mas, para mostrar a invariância de  $\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$  por rotações, é necessário mostrar também que  $[S_i^\pm + S_{i+1}^\pm, \hat{O}_J] = 0$ , o que não é simples.

Para mostrar que  $\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$  é invariante por rotações, seguiremos outra rota. Calculemos o elemento de matriz  $\langle J' M' | \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) | J'' M'' \rangle$ . Mostraremos que  $J' = J$  e  $M' = M''$ , o que significa que  $\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$  é um tensor de ordem zero, ou escalar. Usando a relação de completeza e o TWE, Eq. (4.30), obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle J' M' | \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) | J'' M'' \rangle &= \sum_{M=-J}^J (-1)^M \langle J' M' | Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}) | J'' M'' \rangle \\
 &= \sum_{M=-J}^J \sum_{\tilde{J}, \tilde{M}} (-1)^M \langle J' M' | Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) | \tilde{J} \tilde{M} \rangle \langle \tilde{J} \tilde{M} | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}) | J'' M'' \rangle \\
 &= \langle J' || Y_J(\mathbf{S}_i) || \tilde{J} \rangle \langle \tilde{J} || Y_J(\mathbf{S}_{i+1}) || J'' \rangle \times \\
 &\quad \times \sum_{M=-J}^J \sum_{\tilde{J}, \tilde{M}} (-1)^M \langle \tilde{J} \tilde{J}; \tilde{M} M | \tilde{J} \tilde{J}; J' M' \rangle \langle J'' J; M'' - M | J'' J; \tilde{J} \tilde{M} \rangle \quad (\text{D.1})
 \end{aligned}$$

Usando a seguinte propriedade dos símbolos de Clebsch-Gordan [88]

$$\langle J'' J; M'' - M | J'' J; \tilde{J} \tilde{M} \rangle = (-1)^{J-M} \sqrt{\frac{2\tilde{J}+1}{2J''+1}} \langle J \tilde{J}; M \tilde{M} | J \tilde{J}; J'' M'' \rangle \quad (\text{D.2})$$

e ignorando pré-fatores fora do somatório, chegamos a

$$\sum_{M=-J}^J \sum_{\tilde{J}, \tilde{M}} \langle \tilde{J} \tilde{J}; \tilde{M} M | \tilde{J} \tilde{J}; J' M' \rangle \langle J \tilde{J}; M \tilde{M} | J \tilde{J}; J'' M'' \rangle = \delta_{J', J''} \delta_{M', M''}. \quad (\text{D.3})$$

Ou seja,

$$\langle J' M' | \hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) | J'' M'' \rangle \propto \delta_{J', J''} \delta_{M', M''}, \quad (\text{D.4})$$

o que prova que  $\hat{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1})$  é invariante por rotações.

## Apêndice E

# Cálculo de elementos de matriz reduzidos

Neste Apêndice, desenvolveremos o cálculo dos elementos de matriz reduzidos, introduzidos no texto principal na Eq. (4.30). Para simplificar a notação, chamemos  $\langle J' || Y_J(\mathbf{S}_i) || J'' \rangle \equiv \langle S_2 S_3 J' || Y_J(\mathbf{S}_i) || S_2 S_3 J'' \rangle$ .

### E.1 Elementos de matriz reduzidos de operadores um corpo

Os operadores tensoriais  $Y_J(\mathbf{S}_i)$  ( $i = 2, 3$ ) atuam em somente um dos dois sítios do problema de dois spins  $S_2$  e  $S_3$ . Quando este é o caso, o elemento de matriz reduzido é dado por [54]

$$\langle J' || Y_J(\mathbf{S}_2) || J'' \rangle = (-1)^{S_2+S_3+J''+J} \sqrt{(2J'+1)(2J''+1)} \left\{ \begin{matrix} S_2 & J' & S_3 \\ J'' & S_2 & J \end{matrix} \right\} \langle S_2 || Y_J(\mathbf{S}_2) || S_2 \rangle, \quad (\text{E.1})$$

onde  $\left\{ \begin{matrix} S_2 & J' & S_3 \\ J'' & S_2 & J \end{matrix} \right\}$  é o chamado símbolo  $6j$  de Wigner e o elemento de matriz reduzido  $\langle S_2 || Y_J(\mathbf{S}_2) || S_2 \rangle$  é facilmente calculado usando o TWE mais uma vez, agora isolando  $\langle S_2 S_2 | Y_{J0} | S_2 S_2 \rangle$ :

$$\langle S_2 || Y_J(\mathbf{S}_2) || S_2 \rangle = (-1)^J \sqrt{2S_2+1} \frac{\langle S_2 S_2 | Y_{J0} | S_2 S_2 \rangle}{\langle J S_2; 0 S_2 | J S_2; S_2 S_2 \rangle}. \quad (\text{E.2})$$

### E.2 Teoria de perturbação de primeira ordem

A razão de elementos de matriz reduzidos é o que resta no cálculo da teoria de perturbação de primeira ordem. O numerador  $\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle$  corresponde ao caso em que  $J'' = J' = \tilde{S}$  na Eq. (E.1). O denominador é o elemento de matriz reduzido  $\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle$ , que pode ser calculado a partir do Teorema de Wigner-Eckart, Eq. (4.30), escolhendo também  $J'' = J' = \tilde{S}$

$$\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle = \frac{(-1)^J \sqrt{2\tilde{S}+1} \langle \tilde{S} \tilde{S} | Y_{J0}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S} \tilde{S} \rangle}{\langle J \tilde{S}; 0 \tilde{S} | J \tilde{S}; \tilde{S} \tilde{S} \rangle}. \quad (\text{E.3})$$

Depois de algumas simplificações, obtemos

$$\frac{\langle \tilde{S} || Y_J(\mathbf{S}_2) || \tilde{S} \rangle}{\langle \tilde{S} || Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) || \tilde{S} \rangle} = (-1)^{S_2+S_3+\tilde{S}+J} \frac{(2\tilde{S}+1)!}{(2S_2)!} \sqrt{\frac{(2S_2-J)!(2S_2+J+1)!}{(2\tilde{S}-J)!(2\tilde{S}+J+1)!}} \left\{ \begin{matrix} S_2 & \tilde{S} & S_3 \\ \tilde{S} & S_2 & J \end{matrix} \right\} \frac{\langle S_2 S_2 | Y_{J0}(\mathbf{S}_2) | S_2 S_2 \rangle}{\langle \tilde{S} \tilde{S} | Y_{J0}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S} \tilde{S} \rangle}, \quad (\text{E.4})$$

onde o último termo do lado direito da equação, que envolve a razão de elementos de matriz de Harmônicos Esféricos, é independente da normalização escolhida para estes objetos e igual a

$$\frac{\langle S_2 S_2 | Y_{J0}(\mathbf{S}_2) | S_2 S_2 \rangle}{\langle \tilde{S} \tilde{S} | Y_{J0}(\tilde{\mathbf{S}}) | \tilde{S} \tilde{S} \rangle} = \frac{\prod_{S=\{0, \frac{1}{2}, \dots, \frac{J-1}{2}\}} (S_2 - S)}{\prod_{S=\{0, \frac{1}{2}, \dots, \frac{J-1}{2}\}} (\tilde{S} - S)}. \quad (\text{E.5})$$

Juntando os resultados anteriores, chegamos a

$$\begin{aligned}
 f^{(J)}(S_2, S_3, \tilde{S}) &= \frac{\langle \tilde{S} \| Y_J(\mathbf{S}_2) \| \tilde{S} \rangle}{\langle \tilde{S} \| Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \| \tilde{S} \rangle}, \\
 &= (-1)^{S_2+S_3+\tilde{S}+J} \frac{(2\tilde{S}+1)!}{(2S_2)!} \sqrt{\frac{(2S_2-J)!(2S_2+J+1)!}{(2\tilde{S}-J)!(2\tilde{S}+J+1)!}} \left\{ \begin{matrix} S_2 & \tilde{S} & S_3 \\ \tilde{S} & S_2 & J \end{matrix} \right\} \frac{\prod_{S < J-1} (S_2 - S)}{\prod_{S < J-1} (\tilde{S} - S)} \quad (\text{E.6})
 \end{aligned}$$

O símbolo  $\theta_j$  satisfaz a seguinte propriedade, que envolve trocar um número par de linhas e/ou colunas:

$$\left\{ \begin{matrix} S_2 & \tilde{S} & S_3 \\ \tilde{S} & S_2 & J \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} \tilde{S} & \tilde{S} & J \\ S_2 & S_2 & S_3 \end{matrix} \right\}. \quad (\text{E.8})$$

Uma condição necessária para que o símbolo  $\theta_j$  acima seja não-nulo é que condições triangulares sejam satisfeitas por  $(\tilde{S}, \tilde{S}, J)$  e  $(S_2, S_2, J)$ . Uma triáde  $(l_1, l_2, l_3)$  satisfaz uma condição triangular quando é possível construir um triângulo de arestas  $l_1$ ,  $l_2$  e  $l_3$ . A triáde  $(\tilde{S}, \tilde{S}, J)$  satisfaz a desigualdade triangular somente se  $J < 2\tilde{S}$ . Em um dos casos discutidos no Capítulo 5,  $S_2 = S_3 = \frac{3}{2}$ ,  $\tilde{S} = 1$ , e  $J = 3$ , a desigualdade não é satisfeita. Este caso representa o que chamamos de zero do tipo (i) no Capítulo 5 (ver Seção 5.2.1). A segunda desigualdade triangular, de  $(S_2, S_2, J)$ , é equivalente a  $S_2 < 2\tilde{S}$ , e é sempre satisfeita nos casos que estudamos.

Em outro caso discutido no Capítulo 5,  $S_2 = S_3 = \frac{3}{2}$  novamente, mas  $\tilde{S} = 2$  e  $J = 2$ . As condições triangulares são todas satisfeitas mas, calculando explicitamente a Eq. (E.8), vemos que o símbolo  $\theta_j$  é igual a zero. Este caso corresponde ao que chamamos de zero do tipo (ii), que não poderia ser obtido por meios que não fossem de cálculo explícito.

### E.3 Teoria de perturbação de segunda ordem

Voltamos agora ao cálculo de teoria de perturbação de segunda ordem, para determinar explicitamente a função  $g(J, S)$ . As mudanças, comparado ao caso de teoria de perturbação de primeira ordem, é que os elementos de matriz da Eq. (5.17) são calculados entre estados de momento angular finito e um estado de singlete. Estes elementos de matriz são iguais a

$$\begin{aligned}
 \langle 00 | Y_{J-M}(\mathbf{S}_2) | JM \rangle &= (-1)^{J+2S} \frac{\langle JJ; -MM | JJ; 00 \rangle}{\langle JS; 0S | JS; SS \rangle} \sqrt{(2J+1)(2S+1)} \left\{ \begin{matrix} S & 0 & S \\ J & S & J \end{matrix} \right\} \langle SS | Y_{J0} | SS \rangle, \\
 \langle JM | Y_{JM}(\mathbf{S}_3) | 00 \rangle &= (-1)^{J+2S} \frac{\langle J0; M0 | J0; JM \rangle}{\langle JS; 0S | JS; SS \rangle} \sqrt{(2J+1)(2S+1)} \left\{ \begin{matrix} S & J & S \\ 0 & S & J \end{matrix} \right\} \langle SS | Y_{J0} | SS \rangle.
 \end{aligned}$$

Multiplicando as equações anteriores e simplificando o símbolo  $\theta_j$ , obtemos a função  $g(J, S)$

$$g(J, S) = (-1)^J \left( \frac{1+2S}{1+2J} \right) \frac{(2S-J)!(2S+J+1)!}{(2S+1)!(2S+1)!} |\langle SS | Y_{J0} | SS \rangle|^2. \quad (\text{E.9})$$

Os elementos de matriz de Harmônicos Esféricos que são usados explicitamente neste trabalho são

$$\langle S, S | Y_{10} | S, S \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} S, \quad (\text{E.10})$$

$$\langle S, S | Y_{20} | S, S \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{\pi}} S \left( S - \frac{1}{2} \right), \quad (\text{E.11})$$

$$\langle S, S | Y_{30} | S, S \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{\pi}} S \left( S - \frac{1}{2} \right) (S - 1), \quad (\text{E.12})$$

$$\langle S, S | Y_{40} | S, S \rangle = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} S_2 \left( S_2 - \frac{1}{2} \right) (S_2 - 1) \left( S_2 - \frac{3}{2} \right). \quad (\text{E.13})$$

Note que os elementos de matriz são nulos se  $S < \frac{J}{2}$ , o que imediatamente implica um produto de  $S - S_i$ , com  $S_i < S$ . A única tarefa que resta para tensores de ordens maiores é, então, encontrar o pré-fator multiplicativo. Este pré-fator depende da normalização encontrada para os Harmônicos Esféricos.

Explicitamente, para tensores estudados neste trabalho:

$$g(1, S) = -\frac{(S+1)S}{4\pi}, \quad (\text{E.14})$$

$$g(2, S) = \frac{(S+\frac{3}{2})(S+1)S(S-\frac{1}{2})}{4\pi}, \quad (\text{E.15})$$

$$g(3, S) = -\frac{(S+2)(S+\frac{3}{2})(S+1)S(S-\frac{1}{2})(S-1)}{4\pi}, \quad (\text{E.16})$$

$$g(4, S) = \frac{(S+\frac{5}{2})(S+2)(S+\frac{3}{2})(S+1)S(S-\frac{1}{2})(S-1)(S-\frac{3}{2})}{4\pi}. \quad (\text{E.17})$$

As equações acima sugerem a seguinte fórmula geral para  $g(J, S)$ , para valor arbitrário de  $J$

$$g(J, S) = \frac{(-1)^J (2S+1+J)!}{4\pi (2S+1) 2^{2J} (2S-J)!}, \quad (\text{E.18})$$

$$= \frac{(-1)^J}{4\pi} \left(S + \frac{J+1}{2}\right) \left(S + \frac{J}{2}\right) \dots (S+1) S \left(S - \frac{1}{2}\right) \dots \left(S - \frac{(J-1)}{2}\right), \quad (\text{E.19})$$

com a normalização genérica para tensores de ordem  $J$  sendo  $\langle S, S | Y_{J0} | S, S \rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}} \prod_{S_i=0}^{J-1} (S - S_i)$  [54].

## Apêndice F

# Indo além da primeira ordem de teoria de perturbação quando $\tilde{S} \neq 0$

Vamos mostrar explicitamente como calcular efeitos de segunda ordem para casos concretos onde a teoria de perturbação de primeira ordem feita no Capítulo 5 se anula, mesmo quando o estado fundamental do problema de dois spins tem momento angular  $\tilde{S} \neq 0$ . Os cálculos para encontrar tais renormalizações são longos e precisam ser feitos caso a caso. Além disso, conforme dissemos no texto principal esta abordagem não é suficiente para corrigir o fluxo em baixas energias, já que acoplamentos nulos voltam a aparecer, requerendo (no mínimo) correções de terceira ordem de teoria de perturbação, que não faremos aqui. Vamos nos focar na cadeia de spins  $\frac{3}{2}$ . Começamos olhando os passos de dizimação no eixo  $K^{(3)} < 0$ , onde o estado fundamental local é um spin  $\tilde{S} = 1$ . O zero de acoplamentos efetivos aparece devido ao motivo (i) discutido na Seção 5.2.1. Depois disso, calculamos os efeitos de segunda ordem em spins conectados por tensores  $K^{(2)} > 0$ . Este é o eixo onde a razão (ii) discutida na Seção 5.2.1 leva ao anulamento de correções perturbativas de primeira ordem.

O Hamiltoniano de 4 spins é dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{2,3}^0 + \mathcal{H}_{3,4} \quad (\text{F.1})$$

onde  $\mathcal{H}_{2,3}^0$  é o Hamiltoniano não perturbado. A correção de primeira ordem dá a seguinte correção ao Hamiltoniano

$$\Delta\mathcal{H}^{(1)} = P_{\tilde{S}}\mathcal{H}_{1,2}P_{\tilde{S}} + P_{\tilde{S}}\mathcal{H}_{3,4}P_{\tilde{S}}, \quad (\text{F.2})$$

onde  $P_{\tilde{S}}$  é o projetor no estado de momento angular total  $\tilde{S} \neq 0$ . Vamos considerar, por hipótese, que tal correção se anula. Os motivos para este anulamento foram explicados anteriormente. A correção de segunda ordem é

$$\Delta\mathcal{H}^{(2)} = P_{\tilde{S}}(\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4})\tilde{P}\frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}^0}\tilde{P}(\mathcal{H}_{1,2} + \mathcal{H}_{3,4})P_{\tilde{S}}, \quad (\text{F.3})$$

$$= \Delta\mathcal{H}_{1,2}^{(2)} + \Delta\mathcal{H}_{3,4}^{(2)} + \Delta\mathcal{H}_{(1,2),(3,4)}^{(2)}, \quad (\text{F.4})$$

onde  $\tilde{P} = 1 - P_{\tilde{S}}$ . Há dois tipos de interações efetivas vindas da Eq. (F.3). Pode-se mostrar que o último termo do lado direito  $\Delta\mathcal{H}_{(1,2),(3,4)}^{(2)}$  corresponde a interações *não frustrantes* de três corpos ou de longo alcance e, portanto, será negligenciado na nossa análise.

### F.1 Semi-eixo $K^{(3)} < 0$

Passemos agora ao cálculo explícito de  $\Delta\mathcal{H}_{1,2}^{(2)}$  sobre o semi-eixo  $K^{(3)} < 0$ :

$$\frac{\Delta\mathcal{H}_{1,2}^{(2)}}{K_1^{(2)}} = \sum_{\{M_1, M_2\}=-J}^J (-1)^{M_1-M_2} Y_{JM_1}(\mathbf{S}_1) Y_{J-M_2}(\mathbf{S}_1) \left[ P Y_{J-M_1}(\mathbf{S}_2) \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}^0} \tilde{P} Y_{JM_2}(\mathbf{S}_2) P \right] \quad (\text{F.5})$$

O termo  $Y_{JM_1}(\mathbf{S}_1) Y_{J-M_2}(\mathbf{S}_1)$  pode ser decomposto como uma combinação linear de TEIs que conserva a componente azimutal do momento angular total [54]. A determinação dos coeficientes da decomposição envolve longas contas, que fizemos com o software MATHEMATICA 9. Para  $M_1 = M_2 = -3$ , por exemplo,

$$Y_{J,-3}(\mathbf{S}_1) Y_{J,3}(\mathbf{S}_1) = -\frac{315}{32\sqrt{\pi}} Y_{0,0}(\mathbf{S}_1) + \frac{63}{16} \sqrt{\frac{3}{\pi}} Y_{1,0}(\mathbf{S}_1) - \frac{21}{16} \sqrt{\frac{5}{\pi}} Y_{2,0}(\mathbf{S}_1) + \frac{3}{8} \sqrt{\frac{7}{\pi}} Y_{3,0}(\mathbf{S}_1). \quad (\text{F.6})$$

De maneira geral, colecionando os coeficientes da decomposição, chegamos a acoplamentos efetivos dados por

$$PY_{J-M_1}(\mathbf{S}_2) \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}^0} \tilde{P} Y_{JM_2}(\mathbf{S}_2) P = \frac{1}{K_2^{(3)}} \sum_J \beta_{J',(M_2-M_1)} Y_{J',(M_2-M_1)}(\tilde{\mathbf{S}} = 1). \quad (\text{F.7})$$

Esta equação pode ser inferida simplesmente por conservação da componente azimutal em ambos os lados da equação. Fazendo uso da decomposição Eq. (F.5), encontramos

$$P\mathcal{H}_{1,2} \tilde{P} \frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_{2,3}^0} \tilde{P} \mathcal{H}_{1,2} P = \frac{(K_1^{(3)})^2}{|K_2^{(3)}|} \sum_{J=0}^2 \gamma_J \hat{O}_J \left( \mathbf{S}_1 = \frac{3}{2}, \tilde{\mathbf{S}} = 1 \right).$$

Para este caso em particular, encontramos os valores

$$\gamma_0 = \frac{2079}{128}, \quad \gamma_1 = \frac{63}{20}, \quad \gamma_2 = \frac{189}{100}. \quad (\text{F.8})$$

Negligenciando a constante  $\gamma_0$ , encontramos a interação residual entre o spin  $S_1 = \frac{3}{2}$  e o spin efetivo  $\tilde{S} = 1$ :

$$\Delta\mathcal{H}_{1,2}^{(2)} = \frac{(K_1^{(3)})^2}{|K_2^{(3)}|} \left( \frac{63}{20} \hat{O}_1 + \frac{189}{100} \hat{O}_2 \right), \quad (\text{F.9})$$

onde  $\hat{O}_i = \hat{O}_i(\mathbf{S}_1 = \frac{3}{2}, \tilde{\mathbf{S}} = 1)$ . Por simetria, obtemos também a constante que acopla  $\tilde{S}$  ao  $S_4 = \frac{3}{2}$ , trocando  $1 \leftrightarrow 4$ . Conforme explicado no texto principal, esta correção é suficiente para os primeiros estágios do fluxo, porém, após um certo transiente, acoplamentos nulos voltam a proliferar.

## F.2 Semi-eixo $K^{(2)} > 0$

Os passos de cálculo são análogos ao caso anterior. A decomposição de  $Y_{2,M_1}(\mathbf{S}_1) Y_{2,-M_2}(\mathbf{S}_1)$  dá termos com  $J$  no intervalo de 0 a 3, exceto  $J = 2$ . O Hamiltoniano efetivo que conecta o spin  $S_1 = \frac{3}{2}$  com um spin efetivo  $\tilde{S} = 2$  é, a menos de uma constante aditiva

$$\Delta\mathcal{H}_{1,2}^{(2)} = \frac{(K_1^{(2)})^2}{K_2^{(2)}} \left( \frac{9}{16} \hat{O}_1 - \frac{3}{56} \hat{O}_3 \right). \quad (\text{F.10})$$

Aqui,  $\hat{O}_i = \hat{O}_i(\mathbf{S}_1 = \frac{3}{2}, \tilde{\mathbf{S}} = 2)$ . Assim como na seção anterior, o procedimento é controlado nos primeiros passos, mas zeros são gerados posteriormente, pelo mecanismo explicado na Fig. 5.5 do texto principal.